

305.044

5

W.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

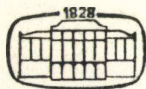
1
983
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

I. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

9

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ELEKTRODINAMIKA LÉZERTEREKBE*

BERGOU JÁNOS
MTA KFKI
Szilárdtest-elméleti osztálya
Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés	1
I. Rész: Szabad töltött részecskék és intenzív sugárzási tér kölcsönhatásának elmélete (Előzmények)	6
1. § Elektronállapotok intenzív térben	6
1.1. Kvantummechanikai mozgásegyenletek megoldása klasszikus külső térben	6
1.2. A kvantummechanikai mozgásegyenletek megoldása kvantált módussal történő kölcsönhatás esetén	12
1.3. Relativisztikus szabad elektron propagátorai külső térben	17
1.4. A klasszikus mozgásegyenletek megoldása	19
2. § Nemlineáris direkt és inverz fékezési sugárzás	22
3. § Intenzív térbeli Compton-szórás	26
4. § Elektron-elektron szórás intenzív térben	29
II. Rész: Szabad töltött részecskék és intenzív sugárzási tér kölcsönhatásának elmélete (saját eredmények)	31
5. § Általános kifejezés a szórási amplitúdóra és egy alkalmazás	32
6. § Perturbációszámítás intenzív térrel történő kölcsönhatás esetén	36
7. § Perturbációszámítás relativisztikus elektronok esetén	39
8. § Optikailag indukált sávszerkezet és a nemrelativisztikus elmélet korlátai	46
9. § Elektron-elektron szórás intenzív térben	50
10. § Nemlineáris szórásfolyamatok kvantált sugárzási térben	56
10.1. Nemrelativisztikus tárgyalás	56
10.2. Relativisztikus tárgyalás	61
Összefoglalás és kitekintés	66
Köszönetnyilvánítás	70
1. Függelék: Relativisztikus jelölések	71
2. Függelék: Fényszerű formalizmus	72
Irodalom	73

BEVEZETÉS

Az értekezésben az intenzív terek elektrodinamikájának egy speciális ágával, nevezetesen az intenzív lézertérben végbemenő sugárzási folyamatok elméletével foglalkozunk. Jelenleg az intenzív elektromágneses tereknek három különböző fajtája ismeretes, melyek erősek lehetnek abban az értelemben, hogy a velük való kölcsönhatás leírásakor megjelenő csatolási paraméter nem tekinthető kicsiny mennyiségnek. Ezek az intenzív terek a következők:

„A megfelelő betűtípus hiányában a nemzetközileg elfogadott Feynman-dárda helyett a megfelelő fogalmakat a betűk aláhúzásával jelöltük.”

* Érkezett 1981. június 5. Kandidátusi értekezés.

a) A nehéz magok Coulomb-tere. Ebben az esetben a sorfejtési paraméter $Z\alpha$ (Z a rendszám, α a finomszerkezeti állandó), melynek értéke ólom esetén 0,6. Ennél nehezebb magokon végbemenő folyamatok leírására nyilvánvalóan nem alkalmazható a Born-közelítés. $Z\alpha > 1$ ($Z > 137$) esetén pedig a vákuum instabillá válik a spontán párképződéssel szemben. Ma még azonban nyitott kérdés, létrehozhatók-e ilyen nehéz magok, melyek élettartama is elegendően hosszú ahhoz, hogy rajtuk kísérleteket lehessen végezni.

b) Erős állandó mágneses terek. Az itt megjelenő sorfejtési paraméter B/B_{cr} , ahol $B_{cr} = \frac{m^2 c^3}{e\hbar} \sim 4,4 \cdot 10^{13}$ Gauss. B_{cr} az a térerősség, amely egy Compton-hullám-hossznyi úton $\left(\frac{\hbar}{mc}\right)$ éppen az elektron nyugalmi tömegével megegyező munkát végez (mc^2). Az eddig ismert legerősebb mágneses tereket a pulzárok felületének közelében figyelték meg, B_{cr} értékétől azonban egy nagyságrenddel ezek is elmaradnak. Földi körülmények között lökéshullámok segítségével végzett mágneses fluxus-összenyomással 10^9 – 10^{10} Gauss érték érhető el. A $B = B_{cr}$ értéktől azonban még ekkor is igen messze vagyunk.

c) Lézerekkel előállított intenzív sugárzási terek. Mint azt majd látni fogjuk, az itt megjelenő alapvető csatolási paraméter a $v^2 = \left(\frac{ea}{mc^2}\right)^2$ mennyiség, ahol a a sugárzási teret leíró (klasszikusnak tekintett) vektorpotenciál amplitúdója. A ma elérhető legnagyobb lézerteljesítmények esetén a v^2 paraméter értéke az egységet jelentősen meghaladhatja, $v^2 \sim 10^1$ – 10^2 is elérhető.

A fenti felsorolásból is kitűnik, hogy az erős elektromágneses terekben végbemenő folyamatok vizsgálatára legígéretesebbnek a nagyintenzitású lézerterekkel történő kölcsönhatások vizsgálata látszik. Valóban, az optikai frekvenciatartományban a 60-as években végbement gyors fejlődés — egyre nagyobb intenzitású, koherens fényforrások (lézerek) megjelenése — felkeltette az érdeklődést az intenzív sugárzási terekben végbemenő alapvető fizikai folyamatok iránt. Legalábbis elvben lehetővé vált ugyanis egész sor olyan új jelenség megfigyelése, melyek elegendően nagy intenzitású sugárzás és anyag kölcsönhatásánál lépnek fel. Melyek ezek a jelenségek?

Az egyik jelenségekörbe tartozó effektusok képezik a nemlineáris optika tárgyát. Ezek az effektusok: felharmonikus keltés az optikai frekvencián, parametrikus kölcsönhatások, különböző indukált szórási folyamatok, önfókuszálás stb. Mindezen jelenségek közös jellegzetessége az, hogy végső soron a sugárzással kölcsönható közeg nemlineáris polarizációjának következtében lépnek fel és eközben a közeg halmazállapota nem változik (nincs párolgás, sugárkárosodás). Az elméleti leírásban ez úgy jelentkezik, hogy elegendő a makroszkopikus elektrodinamika keretein belül maradnunk (Maxwell-egyenletek), amit nemlineáris anyagi egyenletekkel egészítünk ki. Ugyanezen jelenségekörhöz sorolhatjuk a nemlineáris spektroszkópiát, melynek kifejlődése már a 70-es évekre esik. A nemlineáris spektroszkópia fő feladata az intenzív optikai terek abszorpciós spektrumának vizsgálata olyan körülmények között, amikor lényeges szerepet játszanak a többfotonos, illetve kaszkád elnyelési folyamatok, a telítődés és a nagyfrekvenciás Stark-effektus. Ide tartozik pl. a többfotonos ionizáció és a nemlineáris fotoeffektus, melyek kísérleti vizsgálatában a hazai kutatásoknak jelentős hagyományai vannak.

A nemlineáris optikai és nemlineáris spektroszkópiai jelenségek vizsgálatánál feltesszük, hogy a kölcsönhatás ideje alatt a közeg állapota nem változik. Ez a sugárzási tér I intenzitására felső korlátot jelent. Nyilvánvalóan nem teljesül az állapot változatlanságának követelménye, ha a sugárzási tér E_0 amplitúdója összemérhető az atomon belüli tér E_a amplitúdójával, azaz

$$E_0 \sim E_a,$$

Ha az atomi terek erősségét a H-atomon belüli térnek a Bohr-sugárnál felvett értékével jellemezzük, akkor az atomi tér intenzitására $\left(I_a = \frac{c}{4\pi} E_a^2\right)$ az $I_a \cong 5 \cdot 10^{16} \frac{W}{cm^2}$ értéket kapjuk. Ekkora sugárzási tér intenzitásoknál az anyagok már elvesztik egyedi sajátságait és teljesen ionizált plazmává alakulnak. A valóságban azonban az ionizáció már az atomi tereknél kisebb optikai térerősségek esetén elkezdődik, az optikai alagúteffektus révén. Az amplitúdó ehhez tartozó küszöbértéke

$$E_0 \cong \frac{\omega}{\omega_a} E_a,$$

ahol ω az optikai teret, ω_a pedig az atomi átmenetet jellemző körfrekvencia. A megfelelő I_k intenzitásküszöb ekkor

$$I_k \cong \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^2 I_a$$

ω/ω_a tipikus értéke az optikai frekvenciatartományban 0,1 körül van, I_k -ra pedig $10^{14} W/cm^2$ körüli érték adódik.

Ha az I intenzitás értéke meghaladja az I_k értéket, egyetlen optikai periódus alatt végbemegy az atomok teljes ionizációja és az anyagok — kezdeti állapotuktól függetlenül — plazmaállapotba kerülnek, tehát a fényimpulzus csaknem teljes időtartama alatt a kölcsönhatás plazmával történik. Ekkor is lezajlanak olyan jelenségek, melyek jellegüket tekintve a nemlineáris optikához tartoznak és amelyeknél a plazma kollektív tulajdonságai a lényegesek (pl. a plazmarezgéseken történő indukált szórások, önfókuszálás stb.). Fellépnek azonban olyan folyamatok is, melyek a plazmát alkotó szabad, töltött részecskék egyedi sajátságaival vannak kapcsolatban. Ezen folyamatok leírásához már mikroszkopikus elméletre lesz szükségünk. A plazmát alkotó szabad részecskék és az intenzív sugárzási tér kölcsönhatásakor végbemű alapvető folyamatok a következők: az intenzív térbeli fényszórás (Compton-effektus és felharmonikus keltés), a különböző töltésű részecskék szóródása intenzív tér jelenlétében (nemlineáris indukált fékezési sugárzás és abszorpció), valamint azonos töltésű részecskék (elektronok) szóródása intenzív tér jelenlétében (Møllerszórás intenzív térben). Épp ezen folyamatok mikroszkopikus elméletével, illetve a szabad elektronoknak éppen a fenti folyamatokban manifesztálódó intenzív térbeli állapotával foglalkozunk a jelen értekezésben.

A lézerek mai fejlettségi fokán az $I_k < I < I_a$ tartomány elérése megoldottnak tekinthető. Az ún. móduscsatolt üzemmódban működő lézerek pikoszekundum (10^{-12} s) időtartamú fényimpulzusai alkalmasak a fenti tartomány kísérleti megvalósítására.

Ha a lézer intenzitását tovább növeljük — elvben ez megtehető és gyakorlatban is van erre remény, a lézeres fúzióhoz kifejlesztett különlegesen nagyteljesítményű

lézerek révén — akkor még újabb jelenségek fellépte is várható. Az optikai terekben levő szabad töltések követik a tér időbeli változását, rezgő mozgást végeznek. Amikor ezen rezgő mozgás átlagos kinetikus energiája megegyezik a nyugalmi energiával, azaz

$$\frac{e E_0}{mc\omega} \simeq 1$$

esetén az optikai párkeltés valószínűsége már jelentős. Jelölje az ehhez tartozó intenzitásértéket I_{rel} (relativisztikus intenzitásküszöb), erre

$$I_{\text{rel}} = \frac{mc^2}{\hbar\omega} I_k$$

I_{rel} értéke $5 \cdot 10^{18}$ W/cm² körül van.

Az értekezésben elsősorban az $I_k < I < I_{\text{rel}}$ intenzitástartományban lezajló folyamatokat vizsgálunk. A részecskeszámot ekkor megmaradó mennyiségnek tekinthetjük, ami jelentős egyszerűsítést tesz lehetővé. Nem lesz ui. szükségünk a kvantumelektrodinamika teljes apparátusára, az elektronteret mindig a kvantummechanika segítségével (másodkvantálás nélkül) fogjuk tárgyalni. Eredményeink — a felhasznált további közelítésektől függően — általában $I < I_k$ esetén is érvényesek, az $I > I_{\text{rel}}$ esetben pedig kiindulásként szolgálhatnak minden olyan esetben, ahol a párkeltés nem játszik lényeges szerepet.

Foglalkozunk még annak a kérdésnek a megválaszolásával, miért éppen a lézerterekkel történő kölcsönhatás az érdekes, az intenzív terek elektrodinamikájának vizsgálatában. Monokromatikus sugárzás esetén az I intenzitás és a ϱ fotonsűrűség között az alábbi egyszerű összefüggés érvényes

$$I = \hbar\omega\varrho c$$

A diffrakcióelméletből tudjuk, hogy egy $\lambda \left(= \frac{2\pi c}{\omega} \right)$ hullámhosszúságú fényhullám a terjedési irányára merőleges síkban legalább λ^2 kiterjedésű. A szabad elektron és az elektromágneses sugárzás kölcsönhatásakor fellépő karakterisztikus hossz pedig az $r_0 \left(= \frac{e^2}{mc^2} \right)$ klasszikus elektronsugár. Mindez meghatároz egy $V_{\text{kölcs}} = \lambda^2 r_0$ kölcsönhatási térfogatot. Ha a kölcsönhatási térfogatban levő fotonok n száma nagyobb egynél, akkor számíthatunk nemlineáris (más nyelven többfotonos) folyamatok fellépésére, azaz ha teljesül a

$$\varrho\lambda^2 r_0 \gtrsim 1$$

összefüggés. (Az ezen összefüggésből számolható intenzitásküszöb az optikai tartományban jóval kisebb, mint I_k , ez azonban nem meglepő, mert I_k olyan rendszerre vonatkozik, amelyik a kölcsönhatás előtt kötött állapotban van.) A folyamatok pedig akkor mutatnak lényeges kvantumelektrodinamikai sajátosságokat, amikor a kölcsönhatási térfogatban található fotonok energiatartalma összemérhető az elektron nyugalmi energiájával:

$$\frac{\hbar\omega\varrho\lambda^2 r_0}{mc^2} = \varrho\lambda r_0 \gtrsim 1$$

ahol $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ a Compton-hullámhossz. Az innen meghatározható intenzitásküszöb már természetesen megegyezik az előzőekben származtatott I_{rel} -sal.

Látjuk, hogy a két utóbbi összefüggés annál inkább teljesül, minél hosszabb hullámhosszúságú sugárzással van dolgunk. Természetes lenne tehát a nemlineáris effektusokat minél hosszabb hullámhosszúságú tartományban vizsgálni. Mivel azonban a hosszúhullámok sem fókuszálhatók λ^2 -nél kisebb területre, a teljes kimenő teljesítmény olyan hatalmas lenne, amit ma még — a lézerek kivételével — egyetlen más sugárforrás sem teljesít.

Az elektrodinamika történetét áttekintve, könnyen felismerhetjük, hogy mindig is volt érdeklődés a szabad töltések és elektromágneses hullámok kölcsönhatásakor végbemenő folyamatok iránt. Éppen ezek a folyamatok jelentik a kvantumelektrodinamika alapjait, ezért tanulmányozásuk önmagukban is fontos. A lézerek fejlődését követően a nagyintenzitású sugárforrások viszonylag „egyszerű” hozzáférhetősége keltette fel azonban azt a hatalmas elméleti és kísérleti érdeklődést, amelynek napjainkban is szemtanúi vagyunk. Mint láttuk ugyanis, bizonyos intenzitástartományban minden anyag úgy tekinthető, mintha szabad töltésekből állna. Az értekezés témaválasztását éppen ez a nagyfokú érdeklődés motiválta, aktualitását pedig az előzőekben részletesen megindokoltuk. Úgy véljük, hogy az erősen nemlineáris folyamatok leírásához kidolgozott elméleti módszerek és a kapott eredmények egyrészt gazdagítják az elektromágneses kölcsönhatásról szerzett ismereteinket, másrészt mivel nem perturbatív módon származtatjuk azokat, lehetővé teszik régebbi eredmények érvényességi körének megállapítását és így módon talán a kvantumelektrodinamika tesztelését a nagyintenzitások tartományában.

Az értekezésben a fentiekből adódó célkitűzésnek kívántunk eleget tenni. Az első részben áttekintjük a téma előzményeit. Először az intenzív térbeli elektronállapotokra vonatkozó eredményeket ismertetjük (1. fejezet). Itt a klasszikus külső térbeli elektron és a kvantált móddal kölcsönható elektron kvantummechanikai állapotairól egyaránt lesz szó (1.1.§ és 1.2.§). Röviden áttekintjük a peremérték-probléma (Green-függvény 1.3.§) és a klasszikus mozgásegyenletek megoldását (1.4.§) — ez utóbbi ismerete ugyanis sok esetben megkönnyíti a kapott eredmények fizikai interpretálását. A 2. fejezetben a nemlineáris fékezési sugárzás és abszorpció előzményeit vizsgáljuk meg, a 3. fejezetben pedig az intenzív térbeli Compton-szórás elméletét tárgyaljuk. Végül az első rész utolsó fejezetében (4. fejezet) az intenzív térbeli elektron-elektron szórás irodalmát tekintjük át.

A második részben ismertetjük a saját eredményeinket. Az 5. fejezetben meghatározzuk a szórási amplitúdó általános alakját nem perturbatív esetben és egy „ad hoc” módszert használva kiszámítjuk a nemlineáris fékezési sugárzás és abszorpció hatáskeresztmetszetét ([1], [2]). A 6. fejezetben általános, nem a szokásos, hanem nagy intenzitások esetén érvényes perturbációszámításon alapuló módszert mutatunk be nemlineáris folyamatok átmeneti amplitúdóinak meghatározására [3]. A 7. fejezetben megadjuk a módszer relativisztikus általánosítását. Ehhez a külső térbeli elektronállapotok néhány újonnan felismert tulajdonságát használjuk ki, alkalmazásként pedig relativisztikus elektron nemlineáris fékezési sugárzását vizsgáljuk [4]. A 8. fejezetben a külső térbeli nemrelativisztikus mozgásegyenlet egzakt megoldását ismertetjük [5], [6], és megállapítjuk a nemrelativisztikus elmélet alkalmazhatóságának korlátait intenzív tér számításokban. A 9. fejezetben pedig a kapott egzakt megoldás és a 6. fejezetben kifejtett módszer segítségével meghatározzuk a külső tér

jelenlétében végbemenő elektron-elektron szórás hatáskeresztmetszetét, [7], [8]. A 10. fejezetben a kvantált módussal történő kölcsönhatást vizsgáljuk. A 10.1.§-ban nemrelativisztikus elektronok és kvantált módus kölcsönhatását vizsgáljuk dipól-közelítésben és alkalmazzuk az eredményeket a nemlineáris fékezési sugárzásra [9]. A 10.2.§-ban relativisztikus elektron és kvantált sugárzási módus kölcsönhatását vizsgáljuk és a kapott eredményeket az intenzív Compton-szórásra alkalmazzuk [10]. Ily módon a megelőző szemiklasszikus tárgyalásmód megalapozását és érvényességi körének behatárolását nyerjük, másrészt az előzőekben kapott eredményeket általánosítjuk.

Az értekezés végén még egyszer összefoglaljuk és diszkutáljuk a legfontosabb eredményeket és kitekintést adunk további, az intenzív terek elektrodinamikájával kapcsolatos feladatokra.

Az értekezésben használt jelölési konvenciókat (négyes formalizmus) és legfontosabb matematikai összefüggéseket külön Függelékek tartalmazzák, hogy felesleges kitérők ne szakítsák meg a tárgyalás folyamatosságát.

I. RÉSZ. SZABAD TÖLTÖTT RÉSZECSKÉK ÉS INTENZÍV SUGÁRZÁSI TÉR KÖLCSÖNHATÁSÁNAK ELMÉLETE (ELŐZMÉNYEK)

Az értekezés első részében irodalmi áttekintés alapján röviden összefoglaljuk azokat a legfontosabb eredményeket, amelyek az általunk vizsgált — és az értekezés második részében kifejtésre kerülő — kérdéseket és a kapott eredményeket érintik.

1. § Elektronállapotok intenzív térben

Ebben a fejezetben a szabad elektron intenzív térbeli (elsősorban kvantummechanikai) állapotaira vonatkozó fontosabb eredményeket ismertetjük, teljességre való törekvés nélkül. A témakör jóval részletesebb bemutatása néhány összefoglaló cikkben található meg, [11], [12]. Először a klasszikus külső térrel felírt kvantummechanikai mozgásegyenletek megoldásával foglalkozunk (Dirac-, Klein—Gordon- és Schrödinger-egyenlet, 1.1.§), utána megvizsgáljuk a kvantált módussal kölcsönható elektronra vonatkozó eredményeket (1.2.§). Az 1.3.§-ban röviden ismertetjük a peremérték-feladat (Green-függvény) megoldását, végül az 1.4.§-t a klasszikus mozgásegyenlet vizsgálatának szenteljük, mert a továbbiak szempontjából igen tanulságos lesz a klasszikus és kvantummechanikai mozgás összevetése.

1.1. *A kvantummechanikai mozgásegyenletek megoldása klasszikus külső térben*

Nem sokkal a Dirac-egyenlet felállítása után Volkov mutatta meg először, hogy az egyenlet explicit formában egzaktul is megoldható klasszikus elektromágneses síkhullámmal kölcsönható elektron esetén [13]. Azóta többen újrazsgálták ugyanezt a problémát és ismertté vált a Klein—Gordon-egyenlet megoldása hasonló esetre [14], a Schrödinger-egyenlettel kapcsolatos helyzet elemzésére pedig még visszatérünk.

Az alábbiakban a Volkov-megoldás levezetését tekintjük át, nem az eredeti formában, hanem [12]-t és részben [14]-et követve, mert ezek az eredeti levezetésnél sokkal tömörebbek és az általunk használt jelölésrendszerhez legközelebb állnak. A klasszikusnak tekintett, „külső” elektromágneses síkhullámteret az A vektorpotenciállal írjuk le

$$A_\mu(x) \equiv A_\mu(\xi) = a[e_{1\mu}a_1(\xi) + e_{2\mu}a_2(\xi)] \quad (1.1)$$

ahol a az amplitúdó, az $e_{i\mu}$ polarizációs egységvektorok pedig merőlegesek a k_μ hullámvektorra

$$e_{i\mu} = (0, \mathbf{e}_i), \quad e_i^\mu e_{j\mu} = -\delta_{ij}, \quad k^\mu e_{i\mu} = 0 \quad (1.1a)$$

A k_μ hullámvektor ω frekvenciájú síkhullám esetén

$$k_\mu = \frac{\omega}{c}(1, \mathbf{n}), \quad \mathbf{n}^2 = 1 \quad (1.1b)$$

alakban írható, ahol \mathbf{n} a terjedés irányába mutató egységvektor, c pedig a fénysebesség. Az $a_i(\xi)$ függvények tetszőleges alakúak általános elliptikusan polarizált síkhullám esetén, de az x négyes koordinátától csak a

$$\xi = k_\mu x^\mu \quad (1.1c)$$

változón keresztül függenek. Cirkulárisan polarizált esetben pl.

$$a_1 = \cos \xi, \quad a_2 = -\sin \xi \quad (1.1d)$$

lineárisan polarizált esetben pedig

$$a_1 = \cos \xi, \quad a_2 = 0 \quad (1.1e)$$

A fenti négyes-vektorpotenciállal jellemzett külső térben a Dirac-egyenlet alakja a következő

$$(i\partial - \epsilon \underline{A} - \kappa)\psi = 0 \quad (1.2)$$

ahol $\epsilon = \frac{e}{c\hbar}$ (e az elektron töltése), $\kappa = \frac{mc}{\hbar}$. A Dirac-egyenlet tárgyalásánál Bjorken és Drell alapvető művének jelölésrendszerére támaszkodunk [15]. (A Minkowski-tér általunk alkalmazott metrikáját, az ezzel kapcsolatos jelöléseket, valamint a Dirac-egyenlettel kapcsolatos konvenciókat — pl. a Dirac-mátrixok reprezentációját és a Feynman-féle „dárda” jelölést — az 1. Függelékben foglaltuk össze.) Ha bevezetjük a kinetikai négyes impulzus operátorát a

$$\pi = i\partial - \epsilon A \quad (1.2a)$$

definícióval, akkor a Dirac-egyenlet a

$$(\underline{\pi} - \kappa)\psi = 0 \quad (1.2b)$$

alakban írható. A megoldás azon az észrevételen alapul, hogy ha ψ kielégíti a

$$(\underline{\pi} + \kappa)(\underline{\pi} - \kappa)\psi = 0 \quad (1.3)$$

ún. másodrendű Dirac-egyenletet — melyet (1.2b)-ből úgy nyerhetünk, hogy az egyenlet mindkét oldalára a $\underline{\pi} + \kappa$ operátort alkalmazzuk —, akkor $(\underline{\pi} + \kappa)\psi$

az eredeti (1.2) egyenletnek megoldása (mert $\underline{\Pi} + \kappa$ és $\underline{\Pi} - \kappa$ egymással felcserélhetők). (1.3)-at részletesen kiírva:

$$(\Pi^2 - \kappa^2 - \frac{1}{2} \epsilon \sigma F) \psi = 0 \quad (1.4)$$

Itt

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu], \quad F = F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \\ \frac{\epsilon}{2} \sigma F &= \frac{\epsilon}{2} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = i \epsilon k \frac{dA}{d\xi} \end{aligned} \quad (1.4a)$$

$F_{\mu\nu}$ az elektromágneses térerősség tenzor, az $\frac{1}{2} \epsilon \sigma F$ tag a spin-momentum és a tér kölcsönhatását írja le. Keressük ψ -t a következő alakban

$$\psi = e^{-i[p \cdot x + g(\xi)]} u_p \quad (1.5)$$

$g(\xi)$ később meghatározandó mátrixfüggvény, amelyről feltesszük, hogy deriváltjával felcserélhető (a megoldás konkrét alakja ezt a feltevést utólag igazolja), u_p pedig szabad bispinor

$$(p - \kappa) u_p = 0 \quad (1.5a)$$

(1.5)-öt (1.4)-be helyettesítve és (1.5a)-t figyelembe véve $g(\xi)$ -re differenciálegyenletet kapunk

$$\frac{dg}{d\xi} = I_p(\xi) + \frac{1}{2} \epsilon \sigma F(\xi) (2kp)^{-1} \quad (1.6)$$

ahol bevezettük a következő jelölést

$$I_p(\xi) \equiv \frac{1}{2k \cdot p} [2\epsilon p A(\xi) - \epsilon^2 A^2(\xi)] \quad (1.6a)$$

(1.4a) figyelembevételével (1.6) könnyen integrálható;

$$g(\xi) = \int I_p(\xi) d\xi + i \frac{\epsilon}{2k \cdot p} k A \quad (1.7)$$

Felhasználva, hogy $k^2 = k \cdot A = 0$, könnyen igazolható, hogy $(kA)^2 = 0$. Ezért $\exp \left[\frac{\epsilon}{2kp} kA \right] = 1 + \frac{\epsilon}{2kp} kA$, az (1.4) másodrendű Dirac-egyenlet megoldása

$$\psi = \psi_p \equiv \left(1 + \frac{\epsilon}{2kp} kA \right) u_p e^{-ipx - i \int I_p(\xi) d\xi} \quad (1.8)$$

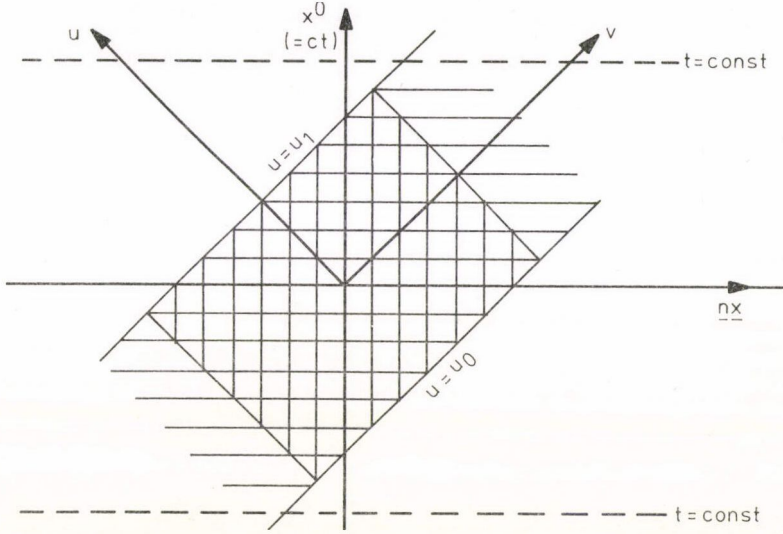
alakban írható. A mondottak szerint az (1.2) Dirac-egyenlet megoldása $(\underline{\Pi} + \kappa) \psi_p$, amelyről belátható, hogy $2\kappa \psi_p$ -vel egyenlő, vagyis (1.8) egyúttal (1.2)-nek is megoldása.

A külső térbeli Dirac-egyenlet tanulmányozásában a következő fontos lépést a kezdetiérték-feladat tisztázása jelentette. Ezt a „fényszerű” formalizmus kidolgozása és a jelen feladatra történő alkalmazása tette lehetővé (Neville és Rohrlich [16], [17], Becker és Mitter [18]). A fényszerű formalizmusra vonatkozó összefüggé-

seket a 2. Függelékben foglaltuk össze. Fényszerű koordinátákat használva az (1.2) Dirac-egyenlet így írható

$$[i\gamma_v \partial_u + i\gamma_u \partial_v - \gamma_i(i\partial_i - \epsilon a a_i(u)) - \kappa] \psi = 0 \quad (1.9)$$

Innen egyrészt azonnal látszik, hogy a négyesimpulzus p_v, p_i ($i=1, 2$) komponensei mozgásállandók. Másrészt tételezzük fel, hogy a lézer működése az $u_0 < u < u_1$ tartományra korlátozódik (1. ábra). Ekkor $a_i(u)=0$, ha $u \notin (u_0, u_1)$. Ez az n irány-



1. ábra. Tér-idő diagram a Volkov-megoldás kezdetiérték-problémájához. A lézerimpulzus az $u=u_0$ és $u=u_1$ közötti vonalkázott területet tölti ki. Az ábráról közvetlenül is látszik, hogy v irányú eltolásra invariáns a rendszer, a p_v impulzuskomponens mozgásállandó

ban (minden t -re) véges méretű impulzust jelent, hasonlóan időben is (minden x -re) korlátos az impulzus hossza. Az (u_0, u_1) tartományon kívül a megoldás szabad síkhullám

$$\psi = e^{-i(u p_u + v p_v - x_i p_i)} u_p \quad (1.10)$$

$$p_u = \frac{1}{2p_v} (\kappa^2 + p_i p_i) \leftrightarrow p^2 = \kappa^2$$

A Volkov-megoldásnak $u=u_0$ -nál a szabad megoldáshoz illeszkedő alakja

$$\begin{aligned} \psi = & \left[1 - \frac{\epsilon a}{2p_v} \gamma_v \gamma_i a_i(u) \right] u_p e^{-i(u p_u^f + v p_v - x_i p_i)} \otimes \\ & \otimes \exp \left\{ i \frac{\epsilon a}{2p_v} \int_{u_0}^u [2p_i a_i(u') - \epsilon a a_i(u') a_i(u')] du' \right\} \end{aligned} \quad (1.11)$$

Ez ekvivalens a

$$\psi = \left[1 - \frac{\epsilon a}{2p_v} \gamma_v \gamma_i a_i(u) \right] u_p e^{-i[u_0 p_u^f + v p_v - x_i p_i + (u - u_0) p_u]} \quad (1.11a)$$

alakkal, ahol

$$p_u = \frac{1}{u - u_0} \int_{u_0}^u \frac{\kappa^2 + \Pi_i(u') \Pi_i(u')}{2p_v} du', \quad \Pi_i(u) = p_i - \epsilon a a_i(u) \quad (1.11b)$$

p_0 és p_v előjele megegyezik, ugyanis $p_0 = \frac{p_v}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{p_u}{p_v} \right)$ és a $\frac{p_u}{p_v}$ mennyiség (1.11b) alapján mindig ≥ 0 . Mivel p_v mozgásállandó, az energia előjele megmarad. Az (1.10) és (1.11) egyenletek a kezdetiérték-feladat megoldását jelentik.

Mivel az $u_0 < u < u_1$ tartomány t -ben nem korlátos, az ábráról leolvasható, hogy az elektron sohasem válik szabaddá (azaz nem válik szét az elektron és a sugárzási tér $t \rightarrow \pm\infty$ esetén sem). Aszimptotikusan szabad megoldást a

$$\psi(x) = \int dp_v f(p_v) \psi_p(x) \quad (1.12)$$

hullámcsomag ír le, amely (1.11) alakú Volkov-állapotok szuperpozíciója megfelelően választott $f(p_v)$ súlyfüggvénnyel (pl. Gauss-eloszlás). Ez az 1. ábra kétszeresen vonalkázott tartományának felel meg.

A Volkov-állapotok ortogonalitását és teljességét a *Ritus* [19] által bevezetett módszerrel vizsgáljuk meg. A Volkov-állapotokat, hasonlóan a szabad síkhullámokhoz, négy csoportba sorolhatjuk: a pozitív és negatív frekvenciás állapotokon (\pm) belül még kétfajta spinállás is lehetséges (melyet az r diszkrét indexszel veszünk figyelembe), azaz

$$\psi = \psi_{pr}^{(\pm)}(x) = E_p^{(\pm)}(x) u_{pr}^{(\pm)} \quad (1.13)$$

ahol az $E_p^{(\pm)}(x)$ mátrixok meghatározása az (1.8)-cal való összehasonlítás alapján

$$E_p^{(\pm)}(x) = \left(1 \pm \frac{\epsilon k A(\xi)}{2kp} \right) e^{\mp i[p \cdot x + \int I_p^{(\pm)}(\xi) d\xi]} \quad (1.13a)$$

és

$$I_p^{(\pm)}(\xi) = \frac{1}{2kp} [\pm 2\epsilon p A(\xi) - \epsilon^2 A^2(\xi)] \quad (1.13b)$$

Ha p -t a továbbiakban tetszőleges négyesvektornak tekintjük (azaz a Volkov-megoldást lefolytatjuk a tömeghéjról), akkor direkt integrálással igazolhatók a következő összefüggések

$$\int \frac{d^4 x}{(2\pi)^4} \overline{E_p^{(\pm)}(x)} E_q^{(\pm)}(x) = \delta^{(4)}(p - q) \quad (1.14a)$$

$$\int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} E_p^{(\pm)}(x) \overline{E_p^{(\pm)}(y)} = \delta^{(4)}(x - y) \quad (1.14b)$$

ahol

$$\bar{E} \equiv \gamma^0 E^\dagger \gamma^0 \quad (1.14c)$$

(1.14a) és (1.14b) az $u_{pr}^{(\pm)}$ spintérbeli ismert teljességi összefüggéseivel együtt a Volkov-állapotok négydimenziós teljességét és ortogonalitását jelentik. Mint később látni

fogjuk, célszerű a tömeghéjon értelmezett háromdimenziós teljességet és ortogonalitást is meghatározni.

A Volkov-állapotok vizsgálatát az optikailag indukált szintstruktúra ismertetésével fejezzük be (Eberly [20]). Cirkulárisan polarizált végtelen kiterjedésű síkhullám esetén (1.13a)-ban az exponenciálisban levő elemi integrálást elvégezve

$$E_p(x) = e^{-i\Phi_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[c_n - \frac{\epsilon a}{\sqrt{2p_v}} \gamma_v (\gamma_+ c_{n-1} + \gamma_- c_{n+1}) \right] \otimes e^{-i[u(p_u^{\text{eff}} - nk) + v p_v - p_i x_i]} \quad (1.15)$$

adódik, ahol

$$\Phi_0 = -\frac{\epsilon^2 a^2}{2p \cdot k} \xi_0 + \frac{\epsilon a p}{p \cdot k} \sin(\xi_0 + \tilde{Q}), \quad \tilde{Q} = \arctg \frac{p_2}{p_1} \quad (1.15a)$$

$$p_{u, \text{eff}} = \frac{1}{2p_v} (\kappa^2 + \epsilon^2 a^2 + p_i p_i) \quad (1.15b)$$

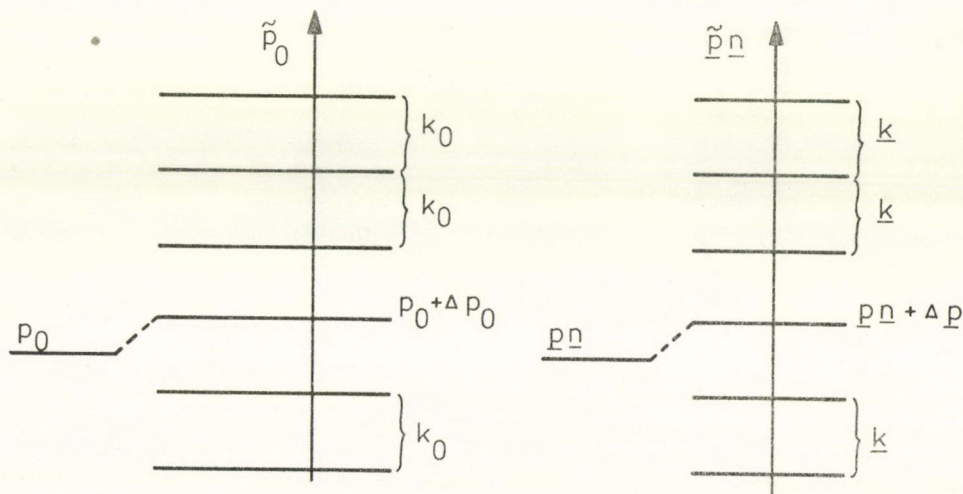
és

$$c_n = J_n \left(\frac{\epsilon a p}{p \cdot k} \right) e^{in\tilde{Q}} \quad (1.15c)$$

A megoldás tehát végtelen sok síkhullám összege, amelyben az egyes tagokhoz tartozó négyesimpulzus a következő feltételnek tesz eleget

$$(p - nk)^2 = \kappa^2 + \epsilon^2 a^2 \equiv \kappa^{*2} \quad (1.16)$$

A megoldás tehát szintszerkezetet mutat, az egyes szintekhez tartozó tömegek (1.16) alapján az intenzitástól függő módon eltolódnak. A szintszerkezetet a 2. ábrán



2. ábra. A Volkov-állapothoz tartozó szintszerkezet. Az energia és impulzus helyett a Zeldovich [21] által bevezetett kvázienergia, illetve a Bloch-féle kváziimpulzus jelenik meg a megoldásban, a mozgást pedig κ^* effektív tömeg jellemzi

tüntettük fel. Megjegyezzük, hogy az egyes összetevő síkhullámok a külső térbeli Dirac-egyenletnek külön nem megoldásai, de a lézertérben levő részecskék számos fizikai sajátága megérthető a kváziszintek alapján.

A külső térbeli töltött részecskék állapotának ismertetését az egyéb megoldások felsorolásával fejezzük be. A Klein—Gordon-egyenlet megoldását megkapjuk, ha (1.8)-ban $\left(1 + \frac{\epsilon k A}{2kp}\right) u_p$ -t 1-gyel helyettesítjük (az (1.4) egyenlet ugyanis a spint tartalmazó $-\frac{1}{2}\epsilon\sigma F$ tag elhagyásával a megfelelő Klein—Gordon-egyenletbe megy át) [14]. Ha ezen megoldás nemrelativisztikus határesetét vesszük, akkor a dipólközelítésben ($k=0$) felírt Schrödinger-egyenlet megoldását kapjuk (Keldysh [22], Kohler [23]). A dipólközelítésen túlmenő megoldást először Nickle [24] adott meg, explicit számításokra is alkalmas analitikus alakban pedig Ehlötzky [25].

A Dirac-egyenlethez visszatérve befejezésül még megemlítiük, hogy az — néhány, a fentiekben tárgyaltnál általánosabb esetben is — megoldható. Anomális mágneses momentummal rendelkező részecskékre Becker és Mitter [18] és Becker [26] adtak megoldást. Egzakt megoldás található arra az esetre is, ha a lézertér mellett még egy állandó mágneses tér is jelen van (Redmond [27], Oleinik [28]). A Dirac- és a Klein—Gordon-egyenlet tisztán algebrai eszközökkel is megoldható (Beers és Nickle [29]). A Kapitza—Dirac-effektushoz [30] hasonló állóhullámú elrendezést többen vizsgáltak (Sen Gupta [31], Berson és Valdmanis [32], Fedorov [33], Becker, Meckbach és Mitter [34], Becker és Mitter [35]). Mint azt ki lehet mutatni, ez az eset, valamint az $n^2 > 1$ törésmutatójú közegben terjedő sugárzás és a szabad elektronok kölcsönhatása (Cronström és Noga [36], Becker [37]) egyaránt Mathieu-típusú differenciálegyenletek megoldására vezethető vissza és ilyen esetben vagy az elektron impulzusa, vagy energiája ún. optikailag indukált sávszerkezetet mutat, hasonlóan a periodikus kristálytérben mozgó Bloch-elektronok viselkedéséhez.

1.2. A kvantummechanikai mozgásegyenletek megoldása kvantált módussal történő kölcsönhatás esetén

A klasszikus külső térbeli elektronállapotok vizsgálatát követően megindult a legegyszerűbb kvantált terekkel (egyetlen módus) kölcsönható elektron állapotainak vizsgálata is és a 60-as évek végén már itt is egzakt eredmények születtek. Az így nyert hullámfüggvények két szempontból tarthatnak számot érdeklődésre: az előző §-ban bemutatott szemiklasszikus módszer (kvantummechanikai leírás az elektronra, klasszikus a térre) megalapozását jelentik és bonyolultabb (pl. explicit módon időfüggő) feladatoknál a nulladik közelítést írhatjuk le segítségükkel. Általánosságban kijelenthető, hogy valamennyi olyan eset, amikor a szemiklasszikus probléma egzaktul megoldható, kvantált módussal történő kölcsönhatás esetén is egzaktul tárgyalható. A legegyszerűbb eset az egyetlen kvantált módussal (monokromatikus elektromágneses hullámmal) kölcsönható relativisztikus elektron leírása, ami a Volkov-probléma közvetlen általánosítását jelenti. A megfelelő Dirac-egyenlet megoldását Berson [38] adta meg. Ugyancsak ő általánosította a megoldást tetszőleges (nem monokromatikus) kvantált síkhullám esetére [39]. Az egy-szerre két térrel — kvantált monokromatikus elektromágneses hullámmal és az ennek terjedési irányával párhuzamos állandó (külső) mágneses térrel — kölcsön-

ható Dirac-elektron stacionárius állapotait és energiaspektrumát pedig szintén Berson [40], valamint Abakarov és Oleinik [41] határozták meg. Végül ezt a problémát a legáltalánosabb esetre — tetszőleges (nem monokromatikus) kvantált síkhullám és a terjedési iránnyal párhuzamos mágneses tér — Fedorov és Kazakov [42] oldották meg. A fenti cikkekben alkalmazott metrika azonban eltérő volt a mi általunk használttól. Ezen felül pedig a keltő és eltüntető operátoroknak koordináta- és differenciál-operátorokkal történő speciális reprezentációját vezették be és így bonyolult parciális differenciálegyenletek megoldására vezették vissza a problémát. Ezért a továbbiakban az általunk kidolgozott algebrai módszer [9], [10] segítségével lényegesen egyszerűbben és áttekinthetőbben származtatjuk a fenti cikkek (elsősorban [40] és [41]) eredményeit. A módszer további előnye, hogy reprezentációfüggetlen eredményekre vezet.

Az elektromágneses teret figyelembe vevő Dirac-egyenlet most is (1.2) alakú

$$[i\partial - \epsilon A - \kappa]\psi = 0 \quad (1.17)$$

ahol az A vektorpotenciál két részből tevődik össze

$$A = A^{(H)} + A^{(S)} \quad (1.18)$$

$A^{(H)}$ az x^3 irányú, állandó H mágneses tér vektorpotenciálja

$$A^{(H)} = (0, -Hy, 0, 0) \quad (= -Hy e_1) \quad (1.18a)$$

$A^{(S)}$ pedig az egyetlen kvantált módust tartalmazó monokromatikus sugárzási teret írja le:

$$A^{(S)} = \alpha [eae^{-ik \cdot x} + e^*a^+e^{ik \cdot x}] \quad (1.18b)$$

Itt a és a^+ a szokásos abszorpciós és emissziós operátorok, melyek az $[a, a^+] = 1$ felcserélési törvénynek tesznek eleget.

Az egyszerűség kedvéért cirkulárisan polarizált módussal foglalkozunk, ekkor e komplex egységvektor

$$e = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 - ie_2), \quad e^2 = e^{*2} = ek = 0, \quad ee^* = -1 \quad (1.18c)$$

Az α állandó konkrét alakja függ a mértékegység-rendszertől, a Gauss-féle cgs rendszerben

$$\alpha = \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \right)^{1/2} \quad (1.18d)$$

ahol V a normálási térfogat. Az (1.17) Dirac-egyenletbe helyettesítve A konkrét alakját az

$$[i\partial - g(eae^{-ik \cdot x} + e^*a^+e^{ik \cdot x}) + \epsilon Hy e_1 - \kappa]\psi = 0 \quad (1.17a)$$

Dirac-egyenletet kapjuk, ahol $g = \epsilon\alpha = \left(\frac{2\pi e^2}{\hbar\omega V} \right)^{1/2}$, egyébként pedig a jelölések meg-egyeznek az (1.2) egyenletben alkalmazottakkal.

Az (1.17a) egyenlet megoldását keressük a következő alakban:

$$\psi = e^{ik \cdot x} \left(a + a + \frac{1}{2} \right) \Phi \quad (1.19)$$

akkor Φ a következő egyenletet elégíti ki:

$$\left[i\partial - k \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - g(\epsilon a + \epsilon^* a^+) + \epsilon H y \epsilon_1 - \kappa \right] \Phi = 0 \quad (1.19a)$$

Mivel az egyenlet az x^0, x^1, x^3 koordinátáktól explicit módon nem függ, csak az ezek szerinti deriválásokat tartalmazza, Φ -t kereshetjük a

$$\Phi = e^{-ip \cdot x} \Phi_p, \quad p = (p^0 p^1, 0, p^3) \quad (1.20)$$

alakban. (1.19a)-ba helyettesítve Φ_p -re az alábbi egyenlet adódik:

$$\left[p - k \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - g(\epsilon a + \epsilon^* a^+) + \epsilon H y \epsilon_1 - i\partial_y \epsilon_2 - \kappa \right] \Phi_p = 0 \quad (1.20a)$$

A probléma így módon lényegében kétdimenzióssá redukálódott, az egyik változó y , a másik pedig pl. a módus állapotát jellemző fotonszám. Hajtsuk most végre a következő unitér transzformációt:

$$\begin{aligned} \Phi_p &= U \varphi \\ U &= \left\{ 1 + \frac{k}{2kp} [g(\epsilon a + \epsilon^* a^+) - \epsilon H y \epsilon_1 + i\partial_y \epsilon_2] \right\} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Ahhoz, hogy jobban lássuk a φ -re érvényes egyenlet fizikai jelentését, célszerű y és ∂_y helyett két új operátort, b -t és b^+ -t bevezetni, a következő definícióval:

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\epsilon H} \left(y + \frac{p_1}{\epsilon H} \right) + \frac{1}{\sqrt{\epsilon H}} \partial_y \right] \\ b^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\epsilon H} \left(y + \frac{p_1}{\epsilon H} \right) - \frac{1}{\sqrt{\epsilon H}} \partial_y \right] \end{aligned} \quad (1.21a)$$

b és b^+ a szokásos bozon-keltő és -eltüntető operátorok felcserélési törvényeit elégítik ki, $[b, b^+] = 1$. Segítségükkel a φ -re vonatkozó egyenlet így írható:

$$\begin{aligned} &\left\{ p - \kappa + \frac{\epsilon H + g^2}{2kp} k \sigma^{12} - \frac{k}{2kp} \left[(2kp + 2g^2) \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \right. \right. \\ &\left. \left. + 2\epsilon H \left(b^+ b + \frac{1}{2} \right) - g'(ab^+ + a^+ b) - p_1^2 \right] \right\} \varphi = 0, \quad g' = 2g \sqrt{\epsilon H} \end{aligned} \quad (1.21b)$$

Evvel a transzformációval elértük, hogy valamennyi bozon-operátort tartalmazó tagnak közös mátrixegységűtthetője van, így a szögletes zárójelen belüli bozon-rész könnyen diagonalizálható.

Megjegyezzük, hogy a megfelelő Klein—Gordon-egyenlet éppen erre a szögletes zárójelbeli kifejezésre redukálható. Ez a rész két kölcsönható harmonikus oszcillátort ír le. Az egyik harmonikus oszcillátor felel meg az elektromágneses módusnak, a másik (b, b^+ -tel leírt) oszcillátor gerjesztett állapotai pedig az állandó mágneses térben precesszáló szabad elektron ún. Landau-nívóinak. Az (1.21b) egyenlet megoldását célszerű szorzatalakban felvenni

$$\varphi = f w_p, \quad (1.22)$$

ahol f a szögletes zárójelbeli kifejezés sajátállapota

$$\left[(2kp + 2g^2) \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + 2\epsilon H \left(b^+ b + \frac{1}{2} \right) - g' (ab^+ + a^+ b) - p_1^2 \right] f = \lambda f \quad (1.22a)$$

w_p pedig a bispinor amplitúdó, a bozon-operátoroktól már független

$$\left[p - \kappa + \frac{\epsilon H + g^2}{2kp} k\sigma^{12} - \frac{k}{2kp} \lambda \right] w_p = 0 \quad (1.22b)$$

mátrixegyenlet megoldása.

Foglalkozunk először az (1.22a) egyenlet diagonalizálásával. Először vezessük be a következő jelöléseket

$$\omega_1 = 2kp + 2g^2, \quad \omega_2 = \epsilon H$$

és keressük f -et az

$$f = Vg, \quad V = e^{-\varphi(ab^+ - a^+ b)} \quad (1.23)$$

alakban. Ha V^+ -et balról az (1.22a) egyenlet mindkét oldalára alkalmazzuk, akkor a

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2g'}{\omega_1 - \omega_2} \quad (1.23a)$$

választás esetén (1.22a)-ból az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\left[\omega'_1 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \omega'_2 \left(b^+ b + \frac{1}{2} \right) - p_1^2 \right] g = \lambda g \quad (1.23b)$$

ahol

$$\omega'_{1,2} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\omega_1 - \omega_2)^2}{4} + g'^2} \quad (1.23c)$$

(1.23b) Fock-reprezentációban már diagonális, azaz, ha a

$$g = |n\rangle_a |s\rangle_b; \quad n, s = 0, 1, 2, \dots \quad (1.24)$$

választással élünk, akkor a λ sajátértékekre a következő egyszerű kifejezést nyerjük:

$$\lambda = \omega'_1 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \omega'_2 \left(s + \frac{1}{2} \right) - p_1^2 \quad (1.25)$$

λ -nak ezt az értékét (1.22b)-be helyettesítve w_p -re már valóban a bozon-operátoroktól független mátrixegyenlet adódik. Az egyenletrendszer determinánsának nulla-helyei szolgáltatják a p^0 energia-sajátértékeket. Bevezetve w_p fényszerű komponenseit, w_u -t és w_v -t (l. 2. Függelék) a [10]-ben megadott eljárásához teljesen hasonlóan a

$$[p^2 - \kappa^2 - \lambda]^2 - h^2 = 0 \quad (h = \epsilon H + g^2) \quad (1.26)$$

sajátérték-egyenlet adódik. Mivel azonban λ függ p -től, ez az egyenlet algebrai eszközökkel nem oldható meg. Ehelyett a következő apró trükkel érhetünk célt. Először is tételezzük fel, hogy w_p a spin 3-ik komponensének sajátállapota $\mu = \pm 1$ sajátértékkel, ekkor $\sigma^{12} \left(= \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} \right)$ egyszerűen μ -vel helyettesíthető (1.22b)-bne.

Vezessük be ezután a

$$q = p - k \left[\frac{\lambda}{2kp} - \frac{\mu h}{2k \cdot p} \right] \quad (1.27)$$

vektort, ennek segítségével (1.22b) így írható:

$$[q - \kappa] w_{q, \mu} = 0. \quad (1.27a)$$

Ez éppen a q impulzusú szabad részecske bispinor-amplitúdójának egyenlete, amiből a jól ismert

$$q^2 = \kappa^2 \quad (1.27b)$$

összefüggés adódik, tehát q a szabad tömeghéjon van. Másrészt, felhasználva, hogy $k \cdot p = k \cdot q$ (ez (1.27)-ből a $k^2 = 0$ figyelembevételével adódik) (1.27)-ből p -t teljesen meghatározhatjuk q -val

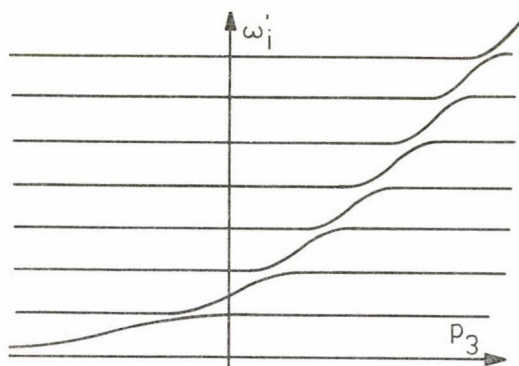
$$p = q + k \left[\frac{\lambda_q}{2kq} - \frac{\mu h}{2kq} \right] \quad (1.28)$$

A rendszer teljes négyesimpulzusa tehát a szabad részecskemozgás négyesimpulzusából, az elektromágneses módus négyesimpulzusából, a mágneses térbeli mozgás négyesimpulzusából, illetve ezen két utóbbi tag kölcsönhatásából származó járulékból, valamint a spin és mágneses tér kölcsönhatásából származó négyesimpulzusból tevődik össze.

A stacionárius állapot hullámfüggvényét úgy kapjuk, hogy a fentiekben alkalmazott unitér transzformációkat fordított sorrendben hajtjuk végre:

$$\psi_{p, n, s, \mu} = e^{ik \cdot x \left(a + a + \frac{1}{2} \right)} e^{-ipx} UV g_{n, s} w_{q, \mu}. \quad (1.29)$$

Végül megjegyezzük, hogy a fenti módszer általánosítható nem monokromatikus síkhullámmal történő kölcsönhatásra, amikor tehát valamennyi olyan módust figyelembe veszünk, amely az x^3 irányba terjed. Ezt a feladatot Fedorov és Kazakov [42] vizsgálták, a lényegesen nehezebb differenciál-operátoros reprezentációt használva a -ra és b -re. Azt találták, hogy a rendszert ekkor az (1.23c)-ben megadott két sajátfrekvencia (egy elektromágneses és egy „ciklotron”-módus) helyett egy sorozat ω'_i sajátfrekvencia jellemzi. A sajátfrekvenciáknak a p_3 impulzustól való függését tüntettük fel a 3. ábrán.



3. ábra. Az ω'_i sajátfrekvenciák függése p_3 -tól. Az egyes rezonanciáknál ($\omega'_i \simeq \omega'_{i+1}$) az egyik elektromágneses módus „ciklotron” módussá alakul és megfordítva. Az adott módus csak a két egymásutáni rezonanciahely közötti tartományon felel meg ciklotron rezgéseknek

síkhullámmal történő kölcsönhatásra, amikor tehát valamennyi olyan módust figyelembe veszünk, amely az x^3 irányba terjed. Ezt a feladatot Fedorov és Kazakov [42] vizsgálták, a lényegesen nehezebb differenciál-operátoros reprezentációt használva a -ra és b -re. Azt találták, hogy a rendszert ekkor az (1.23c)-ben megadott két sajátfrekvencia (egy elektromágneses és egy „ciklotron”-módus) helyett egy sorozat ω'_i sajátfrekvencia jellemzi. A sajátfrekvenciáknak a p_3 impulzustól való függését tüntettük fel a 3. ábrán.

Mint azt Berson [40] kimutatta, ha az (1.29) állapotok alábbi „koherens” szuperpozícióját képez-

zük

$$\psi_{p, \bar{n}, s} = e^{-\bar{n}/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\bar{n})^{n/2}}{n!} e^{in\theta} \psi_{pns} \quad (1.29a)$$

és elvégezzük az $\bar{n} \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $\frac{\bar{n}}{V} = \varrho$ = állandó határátmenetet, akkor az így nyert hullámfüggvény megegyezik a Redmond [27] által klasszikus külső terekkel kölcsönható Dirac-elektronra kapott megoldással.

1.3. Relativisztikus szabad elektron propagátorai külső térben

A külső térbeli Dirac-egyenlet megoldásainak (Volkov-hullámfüggvény) ismerete elegendő minden olyan folyamat hatáskeresztmetszetének számításához, amelyben az elektronok reális részecskéként vesznek részt. Ilyen folyamatok pl. a Compton-szórás, elektron-elektron (Møller)-szórás és a fékezési sugárzás. Mivel szorosan véve ezek a folyamatok képezik az értekezés tárgyát, számunkra nem lesz feltétlenül szükséges a Green-függvények (propagátorok) ismerete. A tervezett további vizsgálatok (pl. két nem-lézer fotonos Compton-szórás és sugárzási korrekciók) számára azonban ez elengedhetetlen, ugyanis ezen folyamatokban az elektron virtuális (közbülső) részecskéként (is) megjelenik. Éppen ezért röviden ezt a témakört is érintjük.

A peremérték-feladat szokásos megfogalmazása a következő (Jauch és Rohrlich [43], Bjorken és Drell [15]): a $\psi(x)$ megoldás legyen adott valamely térszerű hipersíkon (pl. a $t=t_1$ időpontban a hármas térben). Állítsuk elő $\psi(x)$ -et tetszőleges téridő pontokban (pl. egy későbbi időpontban a hármas térben). A feladat szabad részecskére az $S(x-x')$ Green-függvénnyel oldható meg, amely a következő egyenletet elégíti ki

$$(i\partial_x - \kappa)S(x-x') = \delta^{(4)}(x-x') \quad (1.30)$$

$\delta^{(4)}$ a négydimenziós Dirac-deltát jelöli. (1.30) megoldása

$$S(x-x') = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{p - \kappa}{p^2 - \kappa^2} e^{-i(x-x')p}. \quad (1.31)$$

Ezzel

$$\varphi_p(x) = \int_{t'=t} iS(x-x') \gamma^0 \varphi_p(x') d^3 r' \quad (1.32)$$

ahol φ_p szabad síkhullám:

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{\kappa}{p_0} \right)^{1/2} u_p e^{-ipx} \quad (1.32a)$$

Az (1.31) Green-függvény a szabad megoldások segítségével diadikus alakban így állítható elő:

$$S(x-x') = -i \sum_{\text{spin}} \int d^3 p \varphi_p(x) \bar{\varphi}_p(x') \quad (1.32b)$$

Ez a diadikus alak az, amit könnyen általánosíthatunk a külső tér probléma Green-függvényének előállítására oly módon, hogy a szabad megoldások helyett a Volkov-állapotokkal végezzük a diadikus kifejtést. A Volkov-állapotok a p_0 komplex síkon analitikusan folytathatók a tömeghéjon ($p_0^2 = \mathbf{p}^2 + \kappa^2$) kívül és célszerűbb a hár-

masimpulzusra vett integrál helyett négyesimpulzus szerinti integrál alakjában megadni a Green-függvényt. Az (1.8) egyenletben megadott alakot és az (1.14) jelöléseket felhasználva

$$G^{(+)}(x, x') = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} E_p^{(+)}(x) \frac{p + \kappa}{p^2 - \kappa^2 + i0p_0} \overline{E_p^{(+)}(x')} \quad (1.33)$$

(1.33)-ban a retardálásnak megfelelő kontúrt választjuk. (1.33) a következő egyenletnek tesz eleget (a jelölés megegyezik az (1.2a—b) egyenletével).

$$(\Pi_x - \kappa) G^{(+)}(x, x') = \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.33a)$$

így $G^{(+)}$ valóban a külső térbeli Dirac-egyenlet propagátora. Más módszerekkel, de lényegében ugyanezt az alakot állították elő *Brown és Kibble* [14], *Beers és Nickle* [29], *Ritus* [19] és *Mitter* [12].

Az 1.1.§-ban láttuk, hogy skalár elektron esetén a hullámfüggvényt úgy kaphatjuk meg, hogy a Volkov-megoldásban a mátrix amplitúdót és a bispinor részt 1-nek tekintjük. Ugyanezzel az eljárással (1.33)-ból a Klein—Gordon-egyenlet propagátorát kapjuk, ezt elsőként szintén *Brown és Kibble* [14], valamint *Eberly és Reiss* [45], *Reiss és Eberly* [46] vizsgálták. A Klein—Gordon-egyenlet propagátorát jelöljük $\mathcal{G}(x, x')$ -vel és térjünk át impulzusreprezentációra

$$\mathcal{G}(p, p') = \int d^4 x d^4 x' \mathcal{G}(x, x') e^{i(p \cdot x - p' \cdot x')} \quad (1.33b)$$

(1.33)-ból a spinfüggő részeket elhagyva és a kijelölt integrálásokat elvégezve végül

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(p, p') &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta^{(4)}(p - p' + lk) e^{-il\chi} \otimes \\ &\otimes \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{J_{l+n}(\zeta) J_n(\zeta)}{(p - nk)^2 - \kappa_*^2 + i0} \end{aligned} \quad (1.34)$$

adódik, ahol

$$\begin{aligned} \kappa_*^2 &= \kappa^2 + \frac{1}{2} \epsilon^2 a^2, \quad \sin \chi = \frac{(p \cdot e_2)}{\sqrt{(pe_1)^2 + (pe_2)^2}} \\ \zeta &= \frac{\epsilon a}{2k \cdot p} \sqrt{(pe_1)^2 + (pe_2)^2} \end{aligned} \quad (1.34a)$$

(1.34) szerint az impulzustérbeli Green-függvénynek végtelen sok nemdiagonális összetevője és pólusa van. A szabad tömeghőj reláció helyébe a

$$(p - nk)^2 = \kappa_*^2 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.35)$$

összefüggés kerül. Szemléletesen ez azt jelenti, hogy az elektron $m_{\text{eff}} = \frac{\hbar \kappa_*}{c}$ intenzitásfüggő effektív tömeggel rendelkezik a külső sugárzási térben, négyesimpulzusa (azaz energiája és impulzusának k irányú komponense) pedig nívószerkezetet mutat. Ez éppen a már látott optikailag indukált színstruktúra (*Eberly* [20]).

A fenti eredményeket anomális mágneses momentummal rendelkező feles spinű részecskékre (nukleonokra) *Becker* [26] általánosította. A különböző speciális alakokban megadott Green-függvények egymásközi kapcsolatát pedig *Ritus és Nyikisov* [44] tisztázták.

1.4. A klasszikus mozgásegyenletek megoldása

A sugárzás-szabadelektron kölcsönhatásra vonatkozó legfontosabb kvantum-mechanikai eredmények tárgyalása után röviden foglaljuk össze a klasszikus eredményeket is. (Az egyszerűség kedvéért a sugárzás visszahatásától eltekintünk.) Először a nemrelativisztikus esettel foglalkozunk, síkhullám sugárzási terében. Ekkor a mágneses hatások elhanyagolhatók (mert v/c nagyságrendűek) és az elektron klasszikus mozgásegyenlete [11]

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \varphi) \quad (1.36)$$

-re redukálódik. Itt \mathbf{r} az elektron helyzetvektora, ponttal az idő szerinti deriválást jelöltük, \mathbf{E}_0 az elektromos térerősség amplitúdója. Mivel \mathbf{r} (1.36) jobb oldalán is megjelenik, az egyenlet látszólag nemlineáris. Ha azonban az egyenlet mindkét oldalát \mathbf{k} -val skalárisan szorozzuk és kihasználjuk, hogy \mathbf{E} síkhullám sugárzási tér ($\mathbf{E}\mathbf{k}=0$), akkor a

$$\mathbf{k}\dot{\mathbf{r}} = 0 \quad (1.36a)$$

egyenlethez jutunk. Ennek megoldása

$$\mathbf{k}\mathbf{r}(t) = \mathbf{k}\mathbf{r}(0) + \mathbf{k}\mathbf{v}(0)t. \quad (1.36b)$$

A kapott kifejezést (1.36) jobb oldalába helyettesítve

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}_0 \cos[(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}(0))t - \mathbf{k}\mathbf{r}(0) + \varphi]. \quad (1.36c)$$

A jobb oldal argumentumában a Doppler eltolódott frekvencia ($\omega_D = \omega - \mathbf{k}\mathbf{v}(0)$). jelenik meg, a $-\mathbf{k}\mathbf{r}(0)$ állandó tagot pedig beolvaszthatjuk a fázisba ($\varphi' = \varphi - \mathbf{k}\mathbf{r}(0)$). (1.36) megoldása

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(0) + \mathbf{v}(0)t - \frac{e}{m\omega^2} \mathbf{E}_0 \cos(\omega_D t + \varphi'). \quad (1.37)$$

A megoldás tehát az $\omega \rightarrow \omega_D$, $\varphi \rightarrow \varphi'$ helyettesítésektől eltekintve ugyanolyan, mintha az (1.36) egyenlet dipólközelítésben ($\mathbf{k}=0$) érvényes alakjából indultunk volna ki. Nemrelativisztikusan tehát mindig bevezethetünk egy effektív dipólközelítést, ha a mágneses térrel való kölcsönhatást elhagyjuk.

(1.37)-et idő szerint differenciálva (és $\mathbf{v}(0)=0$ -t véve) láthatjuk, hogy a sebesség-oszcillációk amplitúdója $v/c = \frac{eE_0}{mc\omega}$ éppen megegyezik a Bevezetésben definiált intenzitás-paraméterrel. Elegendően nagy térerősségnél (ma ez már hozzáférhető), ez a kifejezés 1-nél nagyobb lehet. Más szavakkal ez annyit jelent, hogy az intenzív térrel való kölcsönhatás mindenképpen relativisztikus. Éppen ezért megvizsgáljuk a relativisztikus mozgásegyenlet megoldását is.

A mozgásegyenlet ekkor a következő:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{m\dot{\mathbf{r}}}{\sqrt{1 - (\dot{\mathbf{r}}/c)^2}} \right] = e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{c} (\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}) \right]. \quad (1.38)$$

Ezen mozgásegyenlet megoldásával többen foglalkoztak (Sen Gupta [47]). Vachaspati [48] megmutatta, hogy az (1.38) differenciálegyenlet síkhullám sugárzási tér esetén közvetlen kvadrátúrára vezethető vissza és megadható az általános megoldása.

Ehelyett másik módszert követünk és a relativisztikus Hamilton—Jacobi-egyenlet segítségével oldjuk meg a feladatot, mert a megoldás így lényegesen áttekinthetőbb [Landau—Lifsic [49], Rohrlich [50]]. Az S hatásfüggvényre vonatkozó relativisztikus Hamilton—Jacobi-egyenletből indulunk ki:

$$\left(\partial S - \frac{e}{c} A\right)^2 = m^2 c^2, \quad S = S(x, p, t). \quad (1.39)$$

Síkhullámtérben $A = A(k \cdot x)$, $k \cdot x = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$. Ha S -et az

$$S = p \cdot x + f(k \cdot x) \quad (1.39a)$$

alakban keressük, akkor f -re közönséges elsőrendű differenciálegyenletet kapunk és ebből S -re az alábbi megoldást nyerjük:

$$S = px - \frac{1}{2kp} \int^{kx} d\xi \left[2 \left(\frac{e}{c} \right) p A(\xi) - \frac{e^2}{c^2} A^2(\xi) \right], \quad p^2 = m^2 c^2. \quad (1.40)$$

A mozgásegyenletek megoldását pedig szokásos módon az alábbi implicit egyenletek megoldásából nyerjük:

$$\frac{\partial S}{\partial x} = P = p + \frac{k}{2kp} \left[2 \left(\frac{e}{c} \right) p A - \frac{e^2}{c^2} A^2 \right] \quad (1.40a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial p} = -\beta = x + \frac{1}{2kp} \int^{kx} d\xi \left[2 \frac{e}{c} A(\xi) \right] - \\ - \frac{2k}{[2kp]^2} \int^{kx} d\xi \left[2 \frac{e}{c} p A(\xi) - \frac{e^2}{c^2} A^2(\xi) \right] \end{aligned} \quad (1.40b)$$

ahol P és β állandók, p és x pedig a kanonikus impulzus és koordináták. Néhány egyszerű esetre (pl. monokromatikus sugárzási tér, lineárisan vagy cirkuláris polarizált fény) (1.40a—b) explicit formára hozható és meghatározható a mozgás pályája.

A fenti egyenletekből következik, hogy az $A(k \cdot x)$ négyespotenciállal jellemzett térben levő részecske gyorsuló mozgást végez, tehát sugározni fog. Határozzuk meg ezen kisugárzott tér A' potenciálját. Ha a részecske világvonalát $z_p(\tau)$ írja le (τ a sajátidő), akkor a részecske négyesáram-sűrűsége

$$j = e \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{dz}{d\tau} \delta^{(4)}(z' - z_p(\tau)). \quad (1.41)$$

Ezzel az áramsűrűséggel, mint forrással az A' potenciál a következő egyenletet elégíti ki

$$\partial^2 A' = \frac{4\pi}{c} j. \quad (1.42)$$

Ha a d'Alembert-egyenlet Green-függvényét bevezetjük a

$$\partial_z^2 G(z - z') = \delta^{(4)}(z - z') \quad (1.43a)$$

definícióval, akkor (1.42) megoldása:

$$A'(z) = \frac{4\pi}{c} \int G(z-z') j(z') dz' \quad (1.43)$$

(1.43) egy konvolúciós integrál, célszerű Fourier-transzformáltakkal kifejezni:

$$\begin{aligned} A'(z) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{4\pi}{c} \int d^4 k' G(k') j(k') e^{-ik'z} = \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^4} \frac{4\pi}{c} \int d^4 k' \frac{j(k')}{k'^2} e^{-ik'z}. \end{aligned} \quad (1.43b)$$

Itt felhasználtuk, hogy $G(k') = -\frac{1}{k'^2}$. Az egyik integrálás (pl. k'_0 szerint) elvégezhető és a retardálásnak megfelelő kontúrt választva:

$$A'(z) = \frac{i}{(2\pi)^2} \int \frac{d^3 k'}{\omega'} [j(k') e^{-ik'z}]_{k'^2=0}; \quad \left(\frac{\omega'}{c}\right) = \mathbf{k}'^2. \quad (1.43c)$$

A szórt fény ε' polarizációjú és k' hullámszámú komponensét az $\varepsilon' j(k')$ Fourier-amplitúdó adja meg. Ezt (1.41) segítségével expliciten is felírhatjuk:

$$\varepsilon' j(k') = e \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \varepsilon' \frac{dz(\tau)}{d\tau} e^{-ik'z(\tau)} \quad (1.44)$$

(1.44)-be behelyettesíthetjük (1.40a)-t és (1.40b)-t és ekkor hosszadalmas, de egyszerű számolás után a következő alakra jutunk:

$$\begin{aligned} \varepsilon' j(k') &= \int_{-\infty}^{\infty} du [\alpha + 2\beta \cos u + 2\gamma \cos 2u] \otimes \\ &\otimes \exp \{i[\zeta u + \xi \sin u + \eta \sin 2u]\} \end{aligned} \quad (1.44a)$$

ahol

$$\alpha = \frac{\varepsilon' \cdot \tilde{p}}{k \cdot \tilde{p}}, \quad \beta = \frac{ea}{c} \frac{1}{2kp} \left[(\varepsilon p) \frac{(\varepsilon' k)}{(kp)} - \varepsilon' \varepsilon \right], \quad \gamma = \frac{1}{8} \frac{e^2 a^2}{c^2} \frac{(k' \cdot k)}{(k \cdot p)^2} \quad (1.44b)$$

$$\zeta = \frac{k' \cdot \tilde{p}}{k \cdot \tilde{p}}, \quad \xi = \frac{ea}{c} \frac{1}{2(k \cdot p)} \left[\frac{k' \cdot k}{k \cdot p} (\varepsilon \cdot p) - (k' \cdot \varepsilon) \right], \quad \eta = \frac{1}{8} \frac{e^2 a^2}{c^2} \frac{k' \cdot k}{(k \cdot p)^2}$$

és

$$\tilde{p} = p + \frac{1}{4} \frac{e^2 a^2}{(kp)c^2} k \quad (1.44c)$$

a részecske átlagos impulzusa (kváziimpulzusa, l. *Zeldovich* [51]). Az integrál kiértékeléséhez az alábbi sorfejtést használjuk (*Abramowitz és Stegun* [52]):

$$e^{iz \sin \varphi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) e^{in\varphi} \quad (1.44d)$$

ahol J_n n -edrendű Bessel-függvény. Ezzel

$$\varepsilon' j(k') = \sum_l [\alpha C_l + \beta(C_{l+1} + C_{l-1}) + \gamma(C_{l+2} + C_{l-2})] \otimes 2\pi\delta(\zeta + l) \quad (1.45)$$

$$C_l = \sum_{r=-\infty}^{\infty} J_{l-2r}(\xi) J_r(\eta). \quad (1.45a)$$

Az (1.45)-ben megjelenő δ -függvény argumentumából láthatjuk, hogy a szórt sugárzás k' hullámszámvektora az alábbi egyenletet elégíti ki:

$$k' \cdot \tilde{p} = l(k \cdot \tilde{p}). \quad (1.46)$$

Az egyenletet a szórt sugárzás frekvenciájára megoldva

$$\omega' = \frac{l\omega}{1 + v^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2}} \quad (1.47)$$

adódik, azaz a szórt sugárzás spektrumában az alaphfrekvencia ($l=1$) mellett megjelennek a felharmonikusok is ($l>1$). (1.47) abban a koordináta-rendszerben érvényes, ahol $\mathbf{p}=0$. A kapott frekvenciafeltételt — mint majd látni fogjuk — a kvantummechanikai számítások is igazolják, de a nevezőben a v^2 -es intenzitásfüggő tag mellett

megjelenik a Compton-eltolódást leíró $\frac{2l\omega}{\omega_c} \sin^2 \frac{\Theta}{2}$ tag is, ami tehát tisztán kvantumos eredetű járulék. Az intenzitásfüggő eltolódás eredete az (1.44c)-vel történő összevetésből derül ki. Az elektron impulzusa \mathbf{k} irányban eltolódik az intenzitástól függő mértékben. Ez az impulzuseltolódás a frekvencia Doppler-eltolódásának felel meg, éppen ezt írja le az (1.47) képlet. Az egyes l -edrendű folyamatok hatáskeresztmetszetei a

$$dE_l = \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} |\varepsilon' j_l(k')|^2 \quad (1.48)$$

kisugárzott energia és a bejövő fluxus hányadosával arányosak. Kimutatható pl., hogy a másodharmonikus generálás (2ω -s Thomson-szórás) és a Thomson-szórás hatáskeresztmetszeteinek viszonya $\sim v^2$.

2. § Nemlineáris direkt és inverz fékezési sugárzás

Az intenzív sugárzási tér (lézer) jelenlétében végbemenő alapvető folyamatok közül legérdekesebben a többfotonos indukált fékezési sugárzást és a többfotonos abszorpciót vizsgálták. Ennek több oka van: viszonylag nagyok az egyes folyamatok hatáskeresztmetszetei és ez elvileg lehetőséget ad a lézertér által kiváltott effektusok megfigyelésére, maguk a folyamatok pedig fontos szerepet játszanak lézerrel megvilágított plazmában és esetleg a plazma fűtésére is felhasználhatók.

A folyamat lényege a következő: vizsgáljunk egy elektront, amely ω frekvenciájú lézertér jelenlétében másik részecskén (atomon, ionon, atommagon) szóródik. Az $\omega_{sp} \leq E_{kin}/\hbar$ frekvenciájú (E_{kin} az elektron kinetikus energiája a szórás előtt) spontán foton mellett lehetséges egy, vagy több ω frekvenciájú foton kisugárzása, vagy elnyelése is. Az elektron ezen utóbbi átmeneteit nevezzük összefoglalóan indukált fékezési sugárzásnak, vagy abszorpciónak (inverz fékezési sugárzásnak).

A következőkben röviden áttekintjük az indukált fékezés sugárzás kvantummechanikai elméletét. Az első olyan számítást, amely a gyenge terek esetén érvényes perturbációs számítás segítségével kapott eredményeken túlmege, *Bunkin és Fjodorov* [52] közölték nemrelativisztikus elektronok és homogén, időfüggő tér (dipólközelítés) vizsgálatával. Mivel a későbbi számításokban is lényegében az általuk bevezetett módszert alkalmazták, ezért ezt a számítást követjük nyomon, de az általunk kidolgozott egységes tárgyalásmóddal [3], az eredetinel áttekinthetőbb és tömörebb formában.

A szórócentrumokat egy $V(\mathbf{r})$ szórópotenciállal reprezentáljuk (ha pl. a plazmában pozitív ionok vannak, akkor $V(\mathbf{r})$ egy árnyékolt Coulomb-potenciál), a probléma Schrödinger-egyenlete ekkor

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad H = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk homogén, csak időfüggő külső teret (dipólközelítés), melynek $\mathbf{A}(t)$ vektorpotenciálja

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{a} \cos \omega t, \quad \mathbf{a} = -\frac{c}{\omega} \mathbf{E}_0 \quad (2.1a)$$

\mathbf{E}_0 a térerősség amplitúdója. A (2.1) Schrödinger-egyenletnek általános megoldása nem ismeretes, közelítő megoldásához — a feladat jellegétől függően — két különböző perturbációs eljárást alkalmazhatunk. Az egyik esetben a külső teret gyengének tételezzük fel a szóró potenciálhoz képest, ekkor H -t így bonthatjuk két részre:

$$H = H_0 + H_1;$$

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad H_1 = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (2.1b)$$

A ψ megoldást pedig H_1 hatványai szerint haladó sor alakjában keressük. A második esetben a $V(\mathbf{r})$ szóró potenciált tételezzük fel gyengének a külső térhez képest és H -t így bontjuk két részre:

$$H = H'_0 + H'_1; \quad (2.1c)$$

$$H'_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2, \quad H = V(\mathbf{r}).$$

Ekkor a ψ hullámfüggvényt $V(\mathbf{r})$ hatványai szerint haladó sor alakjában keressük. Mivel bennünket intenzív térrel történő kölcsönhatás érdekel, ezt az utóbbi módszert követjük. Az

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H'_0 \psi \quad (2.2)$$

Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi_p = e^{-\frac{i}{\hbar} [Et + \varepsilon(t)]} \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} + \int_{t_0}^t \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\tau) d\tau \right] \quad (2.2a)$$

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad \varepsilon(t) = \frac{e^2}{2mc^2} \int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau)^2 d\tau.$$

Ha V -ben elsőrendig megyünk el (Born-közelítés), akkor a $\psi_{p_i} \rightarrow \psi_{p_f}$ átmenet mátrix-eleme:

$$T_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \psi_{p_f} | V | \psi_{p_i} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3r V(\mathbf{r}) \otimes \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[(E_f - E_i)t - (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) \mathbf{r} - \frac{e\mathbf{a}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)}{mc\omega} \sin \omega t \right] \right\}. \quad (2.3)$$

Az exponenciális szinuszfüggvényre az előzőekben már megismert Fourier-kifejtést alkalmazva:

$$T_{fi} = -2\pi i \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(n)} \delta(E_f - E_i - n\hbar\omega) \quad (2.3a)$$

Itt

$$T_{fi}^{(n)} = J_n(z) V(\mathbf{Q}), \quad z = \frac{e\mathbf{a}\mathbf{Q}}{m\hbar\omega}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i \quad (2.3b)$$

$$V(\mathbf{Q}) = \int d^3r V(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{Q} \mathbf{r}}.$$

Az átmeneti amplitúdó ismeretében a Fermi-féle arany szabály szerint megkapható az időegységre jutó átmeneti valószínűség

$$w_{fi}^{(n)} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}^{(n)}|^2 \varrho(E_f), \quad (2.4)$$

ahol

$$\varrho(E_f) = \frac{d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3 dE_f} = \frac{p_f^2 dp_f d\Omega_f}{(2\pi\hbar)^3 dE_f} \quad (2.4a)$$

a végállapot-sűrűség. A hatáskeresztmetszetet (2.4) és a p_i/m bejövő áramsűrűség hányadosaként kapjuk

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega_f} = \frac{p_f}{p_i} J_n^2(z) \frac{d\sigma_{\text{Born}}}{d\Omega_f}, \quad (2.5)$$

ahol

$$\frac{d\sigma_{\text{Born}}}{d\Omega_f} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{Q})|^2 \quad (2.5a)$$

a $V(\mathbf{r})$ háttérpotenciálön történő $p_i \rightarrow p_f (\Delta p = Q)$ rugalmas szóródás hatáskeresztmetszete Born-közelítésben.

(2.3a)-ban a Dirac-féle delta-függvény az energiamegmaradást fejezi ki. Az egyetlen érdekessége, hogy — jóllehet az elektromágneses teret a számítás során klasszikus mennyiségnek tekintettük — az energiamegmaradás mégis úgy interpretálható, mintha az n -edrendű folyamatban n foton emissziója ($n < 0$), illetve abszorpciója ($n > 0$) történne. (2.5)-öt pedig úgy értelmezhetjük, mint az n -fotonos folyamat hatáskeresztmetszetét.

Bunkin és *Fjodorov* alapvető munkája után a fenti eredmények egyszerűbb származtatásával, illetve általánosításával többen is foglalkoztak. Relativisztikus általánosításra *Gyenyiszov* és *Fjodorov* [53], valamint *Brehme* [54] tettek kísérletet.

[53]-ban a Dirac-egyenletből indultak ki, de a hatáskeresztmetszetre explicit kifejezés nem szerepel, a megadott implicit eredmények kapcsolata a nemrelativisztikus esettel pedig nehezen tekinthető át. [54]-ben pedig a Klein—Gordon-egyenlet kölcsönhatási tagját vették figyelembe hibásan és a kapott hatáskeresztmetszet-kifejezés is természetszerűleg tartalmazza ugyanezt a hibát. Éppen ezért relativisztikus elektronok nemlineáris fékezési sugárzását az értekezés második részében még részletesen vizsgálni fogjuk.

A fenti hatáskeresztmetszet formulát *Kroll és Watson* [55] oly módon általánosították, hogy abban a rugalmas szórás Born-közelítésben vett hatáskeresztmetszete helyett a teljes rugalmas szórási hatáskeresztmetszet jelenik meg. A feladat teljesen kvantummechanikai leírását *Osborn* [56] kísérelte meg először, azonban a kvantált módussal történő kölcsönhatás leírásához nem az 1.2.§-ban megismert pontos hullámfüggvényeket használta, hanem olyan közelítéseket tett, amelyek végeredményeként az általa kapott eredmények nem mennek túl a szemiklasszikus elmélet keretein. *Brysk* [57] az *Osborn* által kapott hatáskeresztmetszet formulát használta a plazma abszorpciós együttható kiszámításához, de a mondott okok miatt az ő eredményei is lényegében szemiklasszikusak. A dipólközelítésen túlmenő eredményeket elsőként *Ehlotzky* [58] közölte a (2.2a)-nál pontosabb hullámfüggvényből kiindulva. Az általa nyert eredmények struktúrája megegyezik (2.3)—(2.5)-tel, de $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i - n\hbar\mathbf{k}$ -val kell helyettesíteni ezekben a formulákban. Ez természetesen tovább erősíti az előzőekben kialakított intuitív foton képet. Realisztikusabb külső térre vonatkozó eredményeket *Bunkin és Karapetyan* [59], *Krüger és Jung* [60], illetve *Jung* [61] közölték. *Zoller* [62] pedig sztochasztikus térre (azaz amikor a lézer több egymástól függetlenül oszcilláló módusban működik) általánosította (2.5)-öt. *Fjodorov és Karapetyan* [63] pedig a spontán fékezési sugárzás spektrális eloszlásának módosulását határozták meg intenzív külső tér jelenlétében. Azt találták, hogy a spektrum is rezonanciaszerkezetet mutat, az ω_0 frekvenciáknál csúcsok jelennek meg a spontán emissziós színekben.

A fenti eredmények legnagyobb része klasszikusan is származtatható (l. pl. *Silin* [64], *Pert* [65], *Bunkin, Fjodorov, Kazakov* [66]) és kiindulást jelent a plazma energia-abszorpciós együttható számításakor. Ennek definíciója a következő:

$$K = \sum_{n=1} n\hbar\omega \langle v(\sigma^{(n)} - \sigma^{(-n)}) \rangle \quad (2.6)$$

Itt $\langle \rangle$ az elektronok impulzuseloszlása szerinti átlagot jelöl. Az átlagolást az eloszlásfüggvényre tett különböző feltevések mellett végezhetjük (pl. *Seely és Harris* [67], *Osborn* [56], *Brysk* [57] és *Pert* [65]), ennek nyomkövetése azonban már meghaladja az értekezés kereteit.

Itt most csak néhány alapvető numerikus eredményt idézünk [54]. Tekintsünk 100 eV relatív energiájú elektron-proton ütközést rubin lézerből kilépő sugárzás jelenlétében ($V(\mathbf{r})$ az elektron-proton közötti Coulomb-vonzás). Tételezzük fel, hogy a kezdeti tömegközépponti impulzus iránya egybeesik a lézer polarizációjával. A $\sigma^{(n)}$ hatáskeresztmetszetek az $I = 10^{15}$ Watt/cm² intenzitás közelében lesznek maximálisak, a maximális értékük pl.:

$$\sigma^{(1)} \sim 2 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2, \quad \sigma^{(5)} \sim 5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \quad \sigma^{(100)} \sim 5 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^2, \quad \sigma^{(1000)} \sim 5 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^2.$$

Végül megemlítjük, hogy a nemlineáris fékezési sugárzás első közvetlen kísérleti észlelése (tehát nem a plazma energiaelnyelésén, azaz fűtésén keresztül) 1977-ben

történt. *Weingartshofer és munkatársai* [67] 11 eV-os elektronok szórását vizsgálták argon atomokon. A kölcsönhatási térfogat CO_2 lézerből kijövő 10^9 W/cm^2 intenzitású impulzusokkal világították meg és a szórt elektronok energiáját energiaspektrométerben analizálták. Azt tapasztalták, hogy az eredetileg éles energiaspektrum az első-, másod- és harmadrendű fotonemisszióknak és abszorpcióknak megfelelően a főmaximumokhoz képest kb. szimmetrikusan mellékmaximumokkal rendelkezik. Az elmélet szerint ([60], [61]) a lézerimpulzus időbeli lefutása a lehetséges folyamatok rendjét erősen korlátozza. Ha

$$A = a(t) \cos \omega_0 t, \quad 0 \leq t \leq T \quad (2.7)$$

akkor közelítőleg

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega_f} \simeq \frac{p_f}{p_i} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega_f} \frac{1}{T} \int_0^T dt J_n^2(z(t)) \quad (2.8)$$

ahol $z(t)$ (2.3b)-ből $a \rightarrow a(t)$ helyettesítéssel adódik. Mivel nagy n értékekre a Bessel-függvények erősen oszcillálnak, csak az alacsonyabb rendű folyamatok hatáskeresztmetszete lesz nullától számottevően különböző (meg egyezésben a fenti kísérleti eredménnyel). Körülbelül egyidejűleg *Farkas Győző és munkatársai* végeztek hasonló kísérletet [68], melyben termikus (10^{-2} eV energiájú) elektronokat világították meg

Nd lézerből kijövő 30 ps időtartamú, $I = 10 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ intenzitású fényimpulzusokkal.

Azt tapasztalták, hogy az elektronok a $\hbar\omega = 1,17$ eV fénykvantum egész számú többszörösének megfelelő energiát nyeltek el, valószínűleg a nemlineáris inverz fékezési sugárzás révén. Az n -kvantum elnyelésének valószínűségét arányosnak találták I^n -nel, egyezésben az elméletileg jósolt intenzitásfüggéssel.

3. § Intenzív térbeli Compton-szórás

Ebben a fejezetben az intenzív (lézer) térben lezajló Compton-szórás szemiklasszikus kvantummechanikai elméletét ismertetjük. A folyamat során egyetlen szabad elektron „ütközik” az intenzív sugárzási tér (lézer) fotonjaival és az ütközés során az elektron egy nem-lézer fotont bocsát ki.

Az első, már a Volkov-állapoton alapuló számolást *Alperin* [69] végezte, még jóval a lézerek, azaz a megfelelő nagyintenzitású fényforrások megjelenése előtt. Ezért munkája — hasonlóan *Sengupta* [70] nem sokkal későbbi cikkéhez — lényegében visszhang nélkül maradt. Perturbációszámítás segítségével *Vachaspati* [48] és *Stehle* [71] kaptak először eredményeket olyan esetre, amikor a nemlinearitás nem túl magasrendű. *Fried* [72] volt az első, akit a lézerek megjelenése motivált, ő azonban nem az egzakt Volkov-állapotokból, hanem az infravörös divergencia kiküszöbölésére kidolgozott Bloch—Nordsieck-modell [75] közelítő „szemiklasszikus” hullámfüggvényeiből indult ki. Az ő munkáját követően, körülbelül egy időben *Goldman* [74], *Brown és Kibble* [14], valamint *Nikishov és Ritus* [75] már a Volkov-állapotok segítségével tárgyalták a teljes szemiklasszikus problémát. Viszonylag egyszerű, analitikus eredményeket pedig *Narozsnij, Nikishov és Ritus* [76] kaptak a nemlineáris Compton-szórás hatáskeresztmetszetére, cirkulárisan polarizált lézerfény esetén. Az alábbiakban a három legutóbbi cikk nyomán tekintjük át röviden a hatás-

keresztmetszet és a szórt sugárzás frekvenciájára vonatkozó ún. frekvenciatétel származtatását.

Azon folyamat átmeneti amplitúdója, melynek során a Volkov-elektron egy ε' polarizációjú és k' hullámvektorú nem-lézer fotont emittál, így írható:

$$M_{fi} = -ig' \int d^4x \bar{\psi}_f \underline{\varepsilon}' e^{ik' \cdot x} \psi_i. \quad (3.1)$$

A folyamat során az elektron a p_i paraméterű Volkov-állapotból, mint kezdeti állapotból a p_f paraméterű Volkov-állapotba, mint végállapotba megy át, azaz $\psi_{i,f}$ (1.8) típusú hullámfüggvényeket jelent és

$$g' = \left(\frac{2\pi e^2}{\hbar \omega' V} \right)^{1/2} = (\alpha \lambda' V^{-1})^{1/2} \quad (3.1a)$$

a nem-lézer fotonnal való csatolási állandó.

(3.1)-be behelyettesítve a Volkov-állapotok konkrét alakját, (1.8)-at és a Bessel-függvények generátorfüggvényére vonatkozó

$$e^{iz \sin \theta} = \sum J_n(z) e^{in\theta}$$

összefüggést alkalmazva, (3.1) integrandusa sor alakjában áll elő és az integrálást tagonként elvégezhetjük. Ekkor M_{fi} -re a következő kifejezést kapjuk:

$$M_{fi} = -i(2\pi)^4 \sum_{n=0}^{\infty} \delta^{(4)}(p_f + k' - p_i - (n - \zeta)k) T_n \quad (3.2)$$

ahol lineáris polarizáció esetén ($A = a\varepsilon \cos k \cdot x$)

$$\left. \begin{aligned} T_n &= g' \sum_{s=-1}^1 C_{n-s} M_s, \quad C_n = \sum_m J_{n-2m}(-\zeta) J_m \left(-\frac{1}{2} \eta \right) \\ \zeta &= \varepsilon a \left[\frac{(p' \varepsilon)}{(p' k)} - \frac{(p \varepsilon)}{(p k)} \right], \quad \eta = \zeta = \frac{\varepsilon^2 a^2}{4} \left[\frac{1}{(kp')} - \frac{1}{(kp)} \right] \\ M_0 &= \bar{u}_{p_f r}, \underline{\varepsilon}' u_{p_i r}, \quad M_1 = M_{-1} = \frac{\varepsilon a \bar{u}_{p_f r}}{4} \left[\frac{\varepsilon k \varepsilon'}{(kp')} + \frac{\varepsilon' k \varepsilon}{(kp)} \right] u_{p_i r} \end{aligned} \right\} \quad (3.2a)$$

T_n fenti előállításánál kihasználtuk, hogy az átmeneti amplitúdó invariáns az $\varepsilon'' = \varepsilon' + \lambda k'$ mértéktranszformációra. A fenti alak a $\lambda = -\frac{(k \cdot \varepsilon')}{(k \cdot k')}$ választás esetén adódik, ekkor ui. fennáll, hogy $k \cdot \varepsilon'' = 0$. (3.2)-ben a delta-függvény a négyes-impulzus megmaradását fejezi ki. Segítségével meghatározható a szórt sugárzás frekvenciája, melyre a következő kifejezés adódik:

$$\omega' = \frac{n\omega}{1 + \left[2 \frac{\omega}{\omega_c} + v^2 \right] \sin^2 \Theta / 2}, \quad \omega_c = \frac{mc^2}{\hbar}, \quad v^2 = \frac{\varepsilon^2 a^2}{\kappa^2} \quad (3.3)$$

ω_c a Compton-frekvencia, v a már megismert intenzitásparaméter, Θ pedig a szórási szög (a k és k' vektorok által bezárt szög). Látható, hogy a hullámhossz jól ismert Compton-eltolódása mellett megjelenik egy újabb, intenzitásfüggő elto-

lódás is. A $\hbar \rightarrow 0$ klasszikus határesetben (Thomson-szórás) csak az utóbbi marad meg (a v^2 intenzitásparaméter nem tartalmazza \hbar -t, „klasszikus” mennyiség), éppen ezt a tagot találtuk a klasszikus elméletben (l. (1.47)-et).

A teljes M_{fi} szórási amplitúdó (3.2) szerint inkohereus járulékok összegére bontható, ezek a bejövő nyaláb különböző rendű felharmonikusainak szórását írják le. Szigorúan véve csak az $n=1$ -hez tartozó amplitúdó felel meg a szokásos értelemben vett Compton-effektusnak, az $n>1$ -hez tartozó tagok a felharmonikus keltést írják le. Az egyes inkohereus szórási folyamatok hatáskeresztmetszetét a szokásos módon kaphatjuk meg T_n ismeretében:

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \frac{1}{\varrho} \frac{d\Phi^{(n)}}{d\Omega} \langle |T_n|^2 \rangle_{av} \quad (3.4)$$

ahol ϱ a bejövő fotonok fluxusa ($\sim v^2$), $\Phi^{(n)}$ a végállapotok fázistere, $\langle \rangle_{av}$ pedig a kezdeti spinállapotokra vett átlagolást, a végső spinállapotokra vett összegezését jelenti. Ha a szórt foton polarizációját sem figyeljük meg, akkor a kifejezést ε' -re is összegezzük. $\langle |T_n|^2 \rangle_{av}$ -ra ekkor az alábbi, meglehetősen bonyolult kifejezés adódik

$$\langle |T_n|^2 \rangle_{av} = g'^2 \left\{ \frac{(p \cdot k)^2 + (p' \cdot k)^2}{2\kappa^2 (k \cdot k')} |B_n|^2 - |C_n|^2 \right\} \quad (3.4a)$$

$$B_n = (n - \zeta) |C_n|^2 + \zeta \operatorname{Re} [C_n (C_{n-1}^* + C_{n+1}^*)] + \zeta |C_{n-1} + C_{n+1}|^2. \quad (3.4b)$$

Könnyű belátni, hogy $\langle |T_n|^2 \rangle_{av}$ csak v^{2n} -t és v magasabb rendű hatványait tartalmazza, célszerű ezért Q_n -t bevezetni az alábbi definícióval:

$$\langle |T_n|^2 \rangle_{av} = \frac{g'^2}{4} v^{2n} Q_n. \quad (3.4c)$$

A (3.4) hatáskeresztmetszet ekkor így írható (a laboratóriumi rendszerben, ahol $p=(\kappa, 0, 0, 0)$):

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = (r_0 v^{n-1})^2 \frac{\omega_n'^2}{2n\omega^2} Q_n \quad (3.5)$$

ahol r_0 a klasszikus elektronsugár. (3.5) nagy intenzitások esetén rendkívül bonyolult módon függ v -től. Kis intenzitások esetén ($v \rightarrow 0$), csak az $n=1$ -hez tartozó folyamat járuléka nem tűnik el, ekkor a Klein—Nishina-formulát kapjuk ([49]).

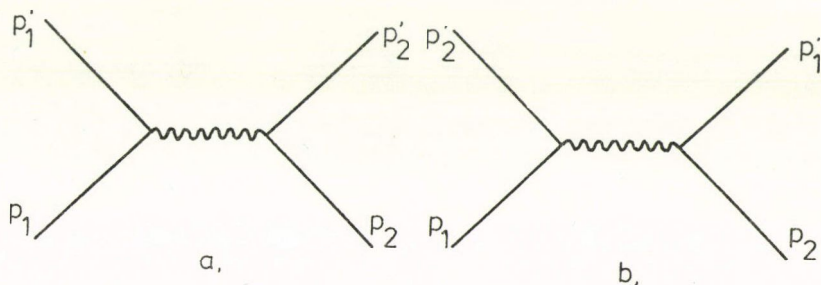
Többen vizsgálták azt a kérdést, mennyiben módosítja a fenti eredményeket az, ha a lézer terét kvantálnak tételezzük fel és az elektront is kvantumtérelmélet segítségével írjuk le. Lényegében azt az eredményt találták, hogy a lézernyaláb állapotát reprezentálhatjuk olyan $|N\rangle$ számsajátállapottal, ahol N nagy, de véges, hasonlóan a V kvantálási térfogathoz, és ha a számítás végén az $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \varrho$ (véges) határmenetet képezzük, akkor az eredmények reprodukálják a fentieket (Fried és Eberly [77], De Baryshe [79], Ehlotzky [79]). Sajnos, ezekben a számításokban nem a már megismert egzakt „kvantált módus + Dirac elektron” állapotokból indultak ki, hanem perturbációs sor összegezték fel. Eközben olyan közelítéseket végeztek, amelyek már eleve szemiklasszikussá tették a megoldást. Hasonló észrevétel vonatkozik Frantz [80] és Kibble [81] munkáira is, akik a lézer állapotát koherens állapottal reprezentálták.

Felmerült az a kérdés is, mi a relaitása az intenzitásfüggő frekvencia (v. hullámhossz) eltolódásnak, melyet a (3.3) egyenlet jósol. Két különböző ellenvetés merült fel ezzel kapcsolatban. Az egyik szerint (*Fried, Baker és Korff* [82], *Von Roos* [83]) a Volkov-állapot nem valódi szórásállapot, azaz az elektron sosem szeparálódik a lézernyalábtól, és a frekvenciaeltolódás ezen nem-fizikai határfeltétel következménye. A másik szerint ([78], [79], [75]) az elektron jellegének a környezet által történő megváltozása megfigyelhetetlen ugyanabban a környezetben. Megmutatható azonban, hogy megfelelő határfeltételek választása esetén ugyanezt a frekvenciaeltolódást kapjuk (*Neville és Rohrich* [17]), bár az eltolódás abszolút értéke érzékeny a pontos határfeltételekre (*Dawson és Fried* [84], *Oleinik és Sinyak* [85]).

Anomális mágneses momentummal rendelkező részecskén történő intenzív Compton-szórás *Becker, Koch és Mitter* [86] vizsgáltak. Legújabbban *Körmendi* [87] foglalkozott szabad elektronnak az igen magas rendű Compton-folyamat során létrejövő fény abszorpciójával, ami a (3.3)-ban látott módosított megmaradási törvények következménye lehet. *Fedorov és McIver* pedig az indukált többfotonos Compton-szórás vizsgálták a szabad-elektron lézerral kapcsolatban [88]. Ez az effektus a Kapitza—Dirac-effektussal együtt (l. pl. *Ehlotzky és Leubner* [89]) azonban már az indukált Compton-szórás (*Oleinik* [90]) speciális esetét jelenti és így — mivel két intenzív móddal történő kölcsönhatást tartalmaznak — nem tartoznak az értekezés szorosan vett témaköréhez.

4. § Elektron-elektron szórás intenzív térben

Az intenzív tér jelenlétében végbemenő Møller-szórás elméleti leírásával először *Oleinik* [90] foglalkozott. A kvantált elektromágneses térrel történő kölcsönhatást a perturbációszámítás második rendjében figyelembe véve, két elektronnak egymáson történő szórását, melyet egy virtuális foton cseréje kísér (a Møller szórás) a 4. ábrán feltüntetett diagramok írják le.



4. ábra. A Møller-szórás legalacsonyabb rendű Feynman-diagramjai. A hullámvonal a q négyesimpulzusú szabad foton Green-függvénye, a vastag vonal az elektron intenzív külső térbeli hullámfüggvénye (Volkov-állapot)

Az ábrán feltüntetett diagramoknak megfelelő mátrixelemet a következő alakban írhatjuk fel:

$$M = -i \epsilon^2 \int d^4x d^4y [\bar{\psi}_{p_1'}(x) \gamma_\mu \psi_{p_1}(x) D_F(x-y) \otimes \bar{\psi}_{p_2'}(y) \gamma^\mu \psi_{p_2}(y) - (p_1' \leftrightarrow p_2')]. \quad (4.1)$$

Itt $D_F(x-y)$ a foton propagátor (pl. [15]), ψ_p a megfelelő Volkov-állapotot jelöli, azaz (1.8) alakú hullámfüggvényt. A zárójelben álló második tag a kicserélődési szórásnak megfelelő 4b. ábrát reprezentálja.

Az átmeneti mátrixelem, valamint a szórási hatáskeresztmetszet kiszámításának részleteivel itt nem foglalkozunk, csak megemlítjük a legfontosabb következményeket. Oleinik rendkívül bonyolult eredményeket kapott, meglehetősen implicit formában, azt azonban kimutatta, hogy a hatáskeresztmetszet rezonancia-szerkezetet mutat. Ha a (3.2)-ben szereplő ζ paraméter helyett most a \tilde{p} effektív impulzust vezetjük be a

$$\tilde{p} = p + \frac{\epsilon^2 a^2}{2(kp)} k \quad (\tilde{p}^2 = \kappa^2(1+v^2)) \quad (4.2)$$

meghatározással, akkor a négyesimpulzus megmaradási törvénye a

$$\tilde{p}'_1 + \tilde{p}'_2 - \tilde{p}_1 - \tilde{p}_2 - nk = 0 \quad (4.3)$$

alakot ölti (k a lézerfotonok négyesimpulzusa). A hatáskeresztmetszetben rezonanciákat figyelhetünk meg, ha

$$(\tilde{p}'_1 - \tilde{p}_1 + rk)^2 = q^2 = 0 \quad \text{vagy} \quad (\tilde{p}'_2 - \tilde{p}_2 + rk)^2 = q^2 = 0 \quad (4.4)$$

azaz, amikor az elektronok által cserélt virtuális foton q négyesimpulzusa a szabad foton tömeghéjra kerül, tehát a folyamat reálissá válik.

A hatáskeresztmetszet kifejezéseket Bös és munkatársai [91] adták meg olyan alakban, amely numerikusan jobban kezelhető. A numerikus eredmények azt mutatják, hogy a hatáskeresztmetszetek a rezonanciatartományokon kívül is jelentősen különböznek a térmentes esetétől. A (4.4) rezonanciafeltételhez tartozó tartományokban pedig a sugárzási korrekciók figyelembevételével meghatározták a rezonanciák pontos helyzetét és szélességét. Ugyanezen szerzők analizálták a szórt részecskék energiaspektrumát is [92]. A lézertér hatása az elektronokra kettős, egyrészt az intenzitásfüggő energiatorlódásban nyilvánul meg, másrészt a lézerfotonok emissziója és abszorpciója diszkrét spektrumot eredményez, ami a legtöbb esetben elfedi az első effektust.

A numerikus vizsgálatok alapján a következőkben foglalhatjuk össze azokat a fizikai feltételeket, amelyek a jóslott effektusok (rezonancia, szórási spektrum) megfigyelését elősegítik:

- kisenergiájú (nem-relativisztikus) elektron energiák,
- kis szórási szög,
- alacsonyrendű folyamat,
- nagy lézer intenzitás,
- nagy lézerfrekvencia.

Elsősorban az első három feltétel az, ami a problémakör konzekvens nemrelativisztikus tárgyalását (természetesen a lényegesen egyszerűbb szerkezetű, analitikus eredmények mellett) indokolja. A második részben ezért visszatérünk a nemrelativisztikus elmélet ismertetésére.

II. RÉSZ. SZABAD TÖLTÖTT RÉSZECSKÉK ÉS INTENZÍV SUGÁRZÁSI TÉR KÖLCSÖNHATÁSÁNAK ELMÉLETE (SAJÁT EREDMÉNYEK)

A szabad töltött részecskék sugárzási térrel történő — az első részben megismert — kölcsönhatásai képezik az elektrodinamika alapfolyamatait (szabad terjedés, elektron szóródása protonon, elektron szóródása elektronon, fény szóródása elektronon). Attól függően, hogy a sugárzási térre, illetve a vele kölcsönható töltésekre milyen (klasszikus vagy kvantált) leírási módot alkalmazunk, beszélünk az elektrodinamika különböző válfajairól. Az alábbi táblázat segít az eligazodásban:

Megjegyezzük — a teljesség kedvéért —, hogy a klasszikus mechanika alapvető fogalma a pálya. A sugárzási tér hasonló — a pálya fogalmán alapuló — leírását jelenti a geometriai optika, ezért a fenti táblázatnak a sugárzási térre vonatkozó részét ki kellene egészíteni egy geometriai optika című oszloppal. Mivel azonban kölcsönhatás ebben a közelítésben a sugárzási tér és az anyag között nincs, ez az oszlop csupa üres helyet tartalmaz és így a táblázatból elhagytuk.

1. TÁBLÁZAT

A fény-anyag kölcsönhatás leírásának különböző lehetséges módjai

Leírási módok		Sugárzási tér	
		Maxwell-elmélet	Kvantált e. m. tér
Anyag	Klasszikus mechanika	I Klasszikus elektrodinamika	—
	Kvantummechanika	II Szemiklasszikus elektrodinamika	III Kisfrekvenciájú kvantum el. din.
	Másodkvantálás	—	IV Kvantumelektrodinamika

A továbbiakban figyelmünket olyan folyamatokra összpontosítjuk, amelyekre a táblázat II. és III. címkéihez tartozó leírásmódok alkalmazhatók. Természetesen a teljesen kvantált formalizmuson alapuló kvantumelektrodinamikai leírás (IV. címke) minden szemponttól a legtokéletesebb leírást adná. Sok szempontból azonban a szemiklasszikus elmélet, illetve a kisfrekvenciájú kvantumelektrodinamika is megfelelő leírásmódot nyújt és konkrét eredmények eléréséhez ez az út célravezetőbbnek bizonyulhat. Melyek ezek az esetek?

Az igen nagy intenzitású fényforrásokot (Q -kapcsolt, ill. módus-csatolt lézerek) elméleti szempontból az jellemzi, hogy bennük az elektromágneses térnek egy (vagy legfeljebb néhány, de kisszámú) módusa van gerjesztve, ezek gerjesztése azonban makroszkopikus. Mind elméletileg, mind kísérletileg igazolták azt is, hogy a gerjesztett módus állapota a kvantummechanikai koherens állapot. A nagygerjesztettségű koherens állapot pedig sok szempontból klasszikus viselkedést mutat. Ez indokolja tehát a szemiklasszikus leírási módot (II. címke), azaz az anyag kvantummechanikai, a sugárzási térnek pedig klasszikus leírásmódját. Mindaddig, amíg az intenzitás (\sim fotonszám) megváltozása a folyamat során nem játszik szerepet, ez a leírásmód

tökéletesen kielégítő. Ha azonban a folyamat során bekövetkező fotonszámváltozás jelentős, akkor ennél jobb közelítésre van szükségünk. Ilyet nyújt a táblázat III. címkeje, ahol kvantált sugárzási térrel hat kölcsön a kvantummechanika által leírt töltött részecske. Mindaddig, amíg a fotonenergia ($\hbar\omega$) jóval kisebb, mint a párkeltési energia ($2mc^2$), a részecskék keletkezését és eltűnését leíró másodkvantált formalizmusra nincs szükség és a kisfrekvenciájú kvantumelektrodinamika megfelelő közelítést jelent. Az optikai tartományban $\hbar\omega (\sim 1 \text{ eV}) \ll 2mc^2 (\sim 1 \text{ MeV})$ ez mindenestre fennáll. Vizsgálni fogjuk tehát az első részben már megismert alapvető folyamatok leírását a szemiklasszikus elektrodinamika, illetve a kisfrekvenciás kvantumelektrodinamika segítségével, továbbá ezen leírásmódok kapcsolatát egymással és a táblázat I. és IV. rovatában szereplő leírásmódokkal. Ennek során részben megalapozzuk az egyes leírásmódokat, mint a magasabb rendű leírásmód határesetét, részben pedig érvényességi körüket is megállapítjuk, egyben pedig konkrét fizikai folyamatokat is vizsgálunk.

5. § Általános kifejezés a szórási amplitúdóra és egy alkalmazás

Ebben a fejezetben általános kifejezést adunk a szórási amplitúdó meghatározására olyan esetben, amikor a kezdeti (vagy vég-) állapotot vagy pontosan ismerjük, vagy legalábbis valamilyen nem-perturbációszámításon alapuló közelítéssel határozzuk meg. A fény-anyag kölcsönhatását leíró Hamilton-operátor időbeli periodicitása megszorítást jelent a keresett hullámfüggvény alakjára. Ebből a megszorításból automatikusan következik — anélkül, hogy a perturbációszámítás egyes rendjeire hivatkoznánk — hogy az átmeneti amplitúdó n -fotonos folyamatok összegére bontható [1]. Az így kapott kifejezést alkalmazzuk a szabad részecskének lézertér jelenlétében egy háttérpotenciálon történő szórására (indukált fékezési sugárzás). A folyamat leírása során a lézertér hatását nem perturbatív módon vesszük figyelembe [2].

Töltött részecskék kölcsönhatását sugárzási térrel háttérpotenciál jelenlétében a következő Hamilton-operátor írja le:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + V(r). \quad (5.1)$$

Itt $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ a részecske impulzusoperátora. \mathbf{A} a vektorpotenciál, m a részecske tömege, e a töltés, c a fénysebesség. A probléma jellegétől függően a Hamilton-operátort két részre bonthatjuk

$$H = H_0 + H' \quad (5.1a)$$

ahol H' vagy $V(r)$, vagy $-\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2$. Az első választás akkor célszerű, ha a teljes szórási folyamat a lézernyalábon belül zajlik le, a második pedig pl. kötött rendszerek (atom) esetén. Tételezzük fel, hogy ismert az

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i^{(0)}}{\partial t} = H_0 \psi_i^{(0)} \quad (5.2a)$$

Schrödinger-egyenlet megoldása ($i H_0$ i -edik sajátállapotára vonatkozik) és keressük az

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = H\psi_i \quad (5.2b)$$

egyenlet megoldását. Mivel a H Hamilton-operátor időben periodikusan változik, azaz

$$H(t+T) = H(t), \quad T = \frac{2\pi}{\omega} \quad (5.3)$$

ahol ω a külső tér körfrekvenciája, ezért — a térben periodikus Schrödinger-egyenlet Bloch-megoldásának analógiájára — mindig található

$$\psi_i(\mathbf{x}, t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i t\right\} u_i(\mathbf{x}, t) \quad (5.4)$$

alakú megoldás, (l. pl. [93]). Itt

$$u_i(t+T) = u_i(t) \quad (5.4a)$$

már teljesen periodikus függvény. ε_i a kvázienergia (értéke csak egy $\hbar\omega$ additív tag erejéig meghatározott, az egymástól csak egész számú $\hbar\omega$ -val különböző ε_i -ket ezért nem tekintjük különbözőnek), ψ_i a kvázistacionárius állapot. Könnyen igazolható, hogy a különböző ψ_i -k ortogonálisak. A következőkben pedig az egyes konkrét folyamatok vizsgálatánál látni fogjuk, hogy a megoldás valóban minden vizsgált esetben (5.4) alakú.

A valódi szórásállapotokat természetesen az (5.4) alakú hullámfüggvényekből kikevert hullámcsomagokkal írhatnánk le. Ehelyett azonban — hasonlóan a csak síkhullámokon alapuló szokásos szórás számításhoz — megelégszünk a kvázistacionárius állapotok közötti átmenetek vizsgálatával. ψ_i a következő integrálegyenletet elégíti ki:

$$\psi_i(t) = \psi_i^{(0)}(t) + \int_{-\infty}^{\infty} dt' G_0^+(t-t') H'(t') \psi_i(t'). \quad (5.5)$$

Itt G_0^+ az (5.2a) egyenlet retardált Green-függvénye, a $\psi_i(t)$ -re vonatkozó határfeltétel pedig $\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_i(t) = \psi_i^{(0)}(t)$. A ψ_i pontos megoldás (5.5) alakját és a megoldások ortogonalitását felhasználva az S szórásoperátor S_{fi} mátrixeleme így írható:

$$S_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} (\psi_f^{(0)}(t) \psi_i(t)) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' (\psi_f^{(0)}(t') H'(t') \psi_i(t')). \quad (5.6)$$

Ha $H' = V(r)$ -t választottuk, akkor mind $\psi_f^{(0)}$, mind ψ_i (5.4) alakú és $u_f^{(0)}(\mathbf{x}, t)$ és $u_i(\mathbf{x}, t)$ egyaránt Fourier-sorba fejthető $e^{in\omega t}$ szerint. Ha pedig $H' = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2$ -t választottunk, akkor H' és $u_i(\mathbf{x}, t)$ fejthető Fourier-sorba. Jelöljük

az így megjelenő sor $e^{in\omega t}$ -s tagjának teljes együttthatóját $T_{fi}^{(n)}$ -nel. Ekkor (5.6)-ban az időintegrálást tagonként elvégezhetjük és eredményül

$$T_{fi} = (S-1)_{fi} = -2\pi i \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(n)} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - n\hbar\omega) \quad (5.7)$$

adódik. Azaz a teljes átmeneti amplitúdó inkoherens tagok összegére bomlik, az n -edik tagot pedig — mint az a delta függvénnyel kifejezett megmaradási törvényből érthető — n foton abszorpciójaként ($n > 0$), vagy emissziójaként ($n < 0$) interpretálhatjuk. Az időegységre eső átmeneti valószínűsége pedig (5.7)-ből a szokásos módon adódik:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |T_{fi}^{(n)}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - n\hbar\omega) \quad (5.8)$$

(5.6), illetve a periodikus időfüggés esetén belőle következő (5.7) az átmeneti amplitúdó számítására általános, nem perturbatív eljárást ad.

Foglalkozzunk most az (5.2b) egyenlet megoldásával a legegyszerűbb esetben, azaz amikor $\mathbf{A} = \mathbf{a} \cos \omega t$, a vektor potenciál független a helytől (dipól-közelítés). (Ez a közelítés igen jól működik akkor, ha a λ fényhullámhossz jóval nagyobb, mint a $V(r)$ potenciál hatótávolsága.) Vezessük be φ -t a következő unitér transzformációval (Henneberger [94])

$$\varphi = U\psi; \quad U = U_1 U_2, \quad (5.9)$$

ahol

$$U_1 = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{S}(t) \hat{\mathbf{p}} \right\}; \quad \mathbf{S}(t) = \frac{e}{mc} \int^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \quad (5.9a)$$

és

$$U_2 = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{e^2}{2mc^2} \int^t \mathbf{A}^2(\tau) d\tau \right\}. \quad (5.9b)$$

Ekkor φ a következő Schrödinger-egyenletet elégíti ki:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r} - \mathbf{S}(t)) \right] \varphi. \quad (5.10)$$

Itt \mathbf{S} a részecske klasszikus trajektóriája, a klasszikus fizikai mozgásegyenletnek tesz eleget:

$$m\ddot{\mathbf{S}} = \frac{e}{c} \dot{\mathbf{A}} = -e\mathbf{E}(t), \quad \mathbf{E}(t) = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \quad (5.11)$$

\mathbf{E} az elektromos tér amplitúdója. U_1 tehát olyan koordinátarendszerre való áttérés operátora, amely a részecskével együtt rezeg. U_2 pedig csak egy állandó fázisfaktort jelent, amely azonban a külső tér homogenitása miatt a végeredményből kiesik. Alkalmazzuk most az (5.6) képletet arra az esetre, amikor

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \quad H' = V(\mathbf{r} - \mathbf{S}(t)). \quad (5.12a)$$

Ekkor a végállapot hullámfüggvénye a szabad részecske egyenletét elégíti ki:

$$\psi_f^{(0)}(t) = \Phi_f(t); \quad i\hbar \frac{\partial \Phi_f}{\partial t} = H_0 \Phi_f, \quad \Phi_f = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_f \mathbf{x} - E_f t)}. \quad (5.12b)$$

Az átmeneti amplitúdóra tehát

$$(S-1)_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt [\Phi_f(t) V(\mathbf{r}-\mathbf{S}(t)) \varphi_i(t)] \quad (5.13)$$

adódik. φ_i -t most Φ_i -nek választva (Born-közelítés) a következő alakot kapjuk:

$$(S-1)_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(E_f - E_i)t - \mathbf{S}(t)(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)] \right\} [\Phi_f(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \Phi_i(\mathbf{r})]. \quad (5.13a)$$

A második zárójelben álló kifejezés éppen a szórás amplitúdó Born-közelítésben. Ismét a Bessel-függvények generátorfüggvényére vonatkozó összefüggést alkalmazva:

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{S}(t)(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) \right\} = \sum_n J_n(z) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} n \hbar \omega t \right\}$$

ahol

$$z = \frac{e}{m\hbar\omega} \mathbf{a} \mathbf{Q}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i, \quad p_f^2 = p_i^2 \pm 2mn\hbar\omega$$

p_f , illetve p_i a végső, illetve kezdeti impulzus, \mathbf{Q} a szórás folyamán létrejövő impulzusváltozás. Ha a fenti sorfejtést (5.13a)-ba helyettesítjük, az idő szerinti integrálás elvégezhető. A kapott eredményből (5.8) alapján meghatározhatjuk az átmeneti valószínűséget, ebből pedig a szórás hatáskeresztmetszetet. Erre végül a következő kifejezés adódik

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega_f} = \frac{p_f}{p_i} J_n^2(z) \frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(el)}}{d\Omega_f}. \quad (5.14)$$

Itt $\frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(el)}}{d\Omega_f}$ a $V(\mathbf{r})$ háttérpotenciálon történő rugalmas szórás differenciális szórás hatáskeresztmetszete Born-közelítésben. Az n -edrendű Bessel-függvény jelenti az n -fotonos folyamat okozta módosítást. A szórás folyamat rugalmas a háttérpotenciálon, de rugalmatlan a külső tér potenciálján.

Az (5.14) végeredmény megegyezik a 2.§-ban más módszerrel kapott (2.5) eredménnyel. Mindez az ebben a fejezetben kifejtett módszer hatékonyságát mutatja, az (5.6)–(5.8) kifejezéseket fogjuk a továbbiakban is az egyes folyamatok vizsgálatánál alkalmazni. Itt jegyezzük meg, hogy a fenti módszer kötött (atomi) elektronok és sugárzási tér kölcsönhatására is alkalmazható, az (5.1) Hamilton-operátor ugyanis ezt az esetet is magába foglalja. Ennek ismertetése azonban már meghaladja az értekezés kereteit.

A továbbiakban olyan perturbációszámítással foglalkozunk részletesen, amely az (5.1a) felbontáson alapul, mégpedig a $H' = V(\mathbf{r})$ választással. Az intenzív térrel történő kölcsönhatáshoz ugyanis ez a választás illeszkedik jobban.

6. § Perturbációszámítás intenzív térrel történő kölcsönhatás esetén

Az előző fejezetben az átmeneti amplitúdó számítására általános módszert (l. (5.6) egyenlet), amely a $\psi_i(t)$ hullámfüggvény pontos ismeretén alapul. Ha speciálisan $\psi_i(t)$ -t perturbációs sor alakjában állítjuk elő, akkor (5.6) a perturbációszámítás ismert kifejezésébe megy át. (5.6) nagy előnye azonban, hogy akkor is alkalmazható, ha $\psi_i(t)$ -t bármilyen egyéb közelítő módszerrel határozzuk meg.

Most azzal a speciális esettel foglalkozunk részletesen, amikor ψ^0 a $H_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$ Hamilton-operátorral felírt Schrödinger-egyenlet megoldása, H' pedig $V(r)$ -rel egyezik meg [3].

Vizsgáljuk meg ezért először a homogén, állandó \mathbf{E}_0 elektromos térben mozgó elektron

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - e\mathbf{E}_0 \hat{\mathbf{x}} \right] \psi \quad (6.1)$$

Schrödinger-egyenletét. Ennek megoldása az Airy-függvények segítségével jólismert (*Landau—Lifsic* [95]), mi azonban más utat választunk. Végezzük el a következő mértéktranszformációt

$$\Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' = \text{grad } \chi, \quad \chi = -c\mathbf{E}_0 \mathbf{x} t. \quad (6.2a)$$

Itt Φ és \mathbf{A} a skalár, illetve vektorpotenciál ((6.1)-ben $\Phi = -e\mathbf{E}_0 \hat{\mathbf{x}}$, $\mathbf{A} = 0$) és χ -t úgy választottuk, hogy az új mértékben $\Phi' = 0$. Az új mértékben a hullámfüggvény

$$\psi' = \exp \left[\frac{ie}{\hbar c} \chi \right] \psi \quad (6.2b)$$

mely a következő Schrödinger-egyenletnek tesz eleget:

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t}. \quad (6.3)$$

Impulzus reprezentációban (6.3) azonnal integrálható, az általános megoldás

$$\psi'(\mathbf{p}, t) = f(\mathbf{p}) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \int_0^t (\mathbf{p} + e\mathbf{E}_0 \tau)^2 d\tau \right) \quad (6.4)$$

$f(\mathbf{p})$ az impulzus tetszőleges függvénye, melyet a határ- (vagy kezdeti) feltételekkel rögzíthetünk. A (6.1) egyenlet jobb oldala időfüggetlen, ezért annak létezik stacionárius megoldása, míg a transzformált (6.3) egyenlet Hamilton-operátora időfüggő. (6.1) stacionárius megoldását $f(\mathbf{p})$ alábbi választása esetén kapjuk (egy dimenzióban)

$$f_E(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar e E_0)^{1/2}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^3}{6meE_0} - \frac{E_p}{eE_0} \right) \right]. \quad (6.4a)$$

Itt E a stacionárius állapot energiája, p az impulzusa $\left(E = \frac{p^2}{2m} \right)$.

Időfüggetlen Hamilton-operátor esetén a választás az időfüggő (6.4) és a stacionárius (6.4a) bázisok között bizonyos fokig önkényes, de explicit módon időfüggő terek esetén az előző az, amelyet könnyen általánosíthatunk erre az esetre. Tételezzük fel, hogy az elektron homogén, periodikusan időfüggő térrel hat kölcsön. A skalárpotenciállal felírt Schrödinger-egyenlet

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - e\mathbf{E}_0 \hat{\mathbf{x}} \cos \omega t \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad A = 0 \quad (6.5a)$$

vektor potenciállal pedig

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega t \right)^2 \psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t}, \quad (6.5b)$$

$$\mathbf{A}' = -\frac{c}{\omega} \mathbf{E}_0 \sin \omega t, \quad \varphi' = 0.$$

A fentiekben leírt mértéktranszformáció generátorfüggvénye $\chi = -\frac{c}{\omega} \mathbf{E}_0 \mathbf{x} \sin \omega t$.

A Schrödinger-egyenlet (6.1) és (6.5a) alakja az, ami miatt a homogén tér közelítést dipól-közelítésnek nevezik (ex dipólus és \mathbf{E} külső tér kölcsönhatása). Mint láttuk, ez akkor jelent jó közelítést a lézerrel történő kölcsönhatás esetén, ha a problémában megjelenik egy olyan kölcsönhatási hossz, amely sokkal kisebb, mint a λ fényhullámhossz, azaz a térerősség megváltozása a kölcsönhatási tartományon belül elhanyagolható. A dipólközelítésen túlmenő eredményekkel a későbbiekben még fogunk foglalkozni.

A (6.5b) egyenlet megoldása impulzusreprezentációban azonnal felírható:

$$\psi'(\mathbf{p}, t) = g(\mathbf{p}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \int^t \left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega \tau \right)^2 d\tau \right]. \quad (6.6)$$

Az $\omega \rightarrow 0$ határesetben ez megegyezik (6.4)-gyel. (6.5a) megoldása impulzusreprezentációban $\psi(\mathbf{p}, t) = \psi' \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega t \right)$. A megoldások koordinátareprezentációban pedig így írhatók:

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p' e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}} \psi'(\mathbf{p}', t) \\ \psi(\mathbf{x}, t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e\mathbf{E}_0 \mathbf{x}}{\omega} \sin \omega t} \psi'(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (6.7)$$

A szokásos síkhullámmegoldást a $g(\mathbf{p}') = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ választással kapjuk. Itt jegyezzük meg, hogy a (6.5b) Schrödinger-egyenlet impulzusreprezentációban diagonális, ezért dipól-közelítésben az elektromágneses térrel történő kölcsönhatás nem változtatja meg az elektronok impulzuseloszlását. Néhány újabb keletű kísérleti eredmény ([67], [68]) értelmezéséhez tehát a dipólközelítésen túlmenő eredmények szükségesek ([3]).

Alkalmazzuk most a fentieket ismét az általunk leggyakrabban vizsgált modell-problémára: elektronok szóródására $V(r)$ háttérpotenciálon külső tér jelenlétében

(indukált fékezési sugárzás). A Schrödinger-egyenlet ekkor

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (H_0 + H')\psi \quad (6.8)$$

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega t \right)^2, \quad H' = V(\mathbf{r}).$$

Jelöljük a (6.7) egyenletben szereplő $\psi'(\mathbf{x}, t)$ -t ψ_p -vel a $g(\mathbf{p}') = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ választás esetén ($\{\psi_p\}$ teljes ortonormált rendszer) és keressük (6.8) megoldását a következő alakban:

$$\begin{aligned} \psi_i(\mathbf{x}, t) &= \psi_{p_i} + \psi_1 \\ \psi_1 &= \int a_p(t) \psi_p d^3p \end{aligned} \quad (6.9)$$

a $\psi_i(t=0) = \psi_{p_i}$ kezdeti feltétellel. (6.8)-ba helyettesítve és a $V(r)$ -ben magasabbrendű tagokat elhanyagolva $a_p(t)$ -re a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{da_p(t)}{dt} &= V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i) \otimes \\ &\otimes \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \int^t \left[\left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega \tau \right)^2 - \left(\mathbf{p}_i + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega \tau \right)^2 \right] d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Itt $V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i) V(\mathbf{r})$ -nek $e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i) \cdot \mathbf{x}}$ szerinti Fourier-transzformáltja. (6.10) megoldása közvetlen integrálással azonnal adódik és így (6.9)-ből megkaphatjuk $\psi_i(\mathbf{x}, t)$ közelítő kifejezését. (5.6)-ba helyettesítve az átmeneti amplitúdóra az

$$\begin{aligned} (S-1)_{fi} &= -\frac{i}{\hbar} V(\mathbf{Q}) \otimes \\ &\otimes \int^t dt' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \int^{t'} \left[\left(\mathbf{p}_f + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega \tau \right)^2 - \left(\mathbf{p}_i + \frac{e\mathbf{E}_0}{\omega} \sin \omega \tau \right)^2 \right] d\tau \right\} \end{aligned} \quad (6.11)$$

kifejezést nyerjük. Ez a kifejezés megegyezik a korábban már megismert (2.3), illetve (5.14) kifejezésekkel, csak most mélyebb megalapozással, illetve nem egy ad hoc módszerrel jutottunk el hozzá. Az előzőekben követett módszer szerint a szórási hatáskeresztmetszet kiszámítható és n -fotonos folyamatok összegeként állítható elő ($n > 0$ abszorpció, $n < 0$ emisszió)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_n \frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega}, \quad \frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} J_n^2(z) \frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(el)}}{d\Omega} \quad (6.12)$$

(vö. (5.14)-gyel).

A fenti módszer nagy előnye, hogy — ha szükséges — igen egyszerűen kaphatunk $V(r)$ -ben magasabbrendű közelítéseket, ellentétben az előző fejezetben ismertett ad hoc módszerrel, ahol a perturbációs potenciál lényegesen bonyolultabb alakú volt. Ezen felül a módszer könnyen általánosítható relativisztikus esetre és bonyolultabb esetekben is alkalmazható. Éppen a relativisztikus általánosítás lesz a következő fejezet tárgya.

7. § Perturbációszámítás relativisztikus elektronok esetén

Az előző fejezetben kifejtett intenzív térbeli folyamatok leírására szolgáló perturbációszámítás relativisztikus általánosítását adjuk meg ebben a fejezetben. A módszer alapjául a külső térbeli Dirac-egyenlet egzakt megoldását, azaz az 1. §-ban ismertetett Volkov-állapotokat választjuk (l. (1.8)). Az 1. §-ban kifejtett eljárás során a Dirac-egyenletet másodrendűvé alakítottuk és ezt az egyenletet oldottuk meg. Ezért most először megmutatjuk, hogy maga (az elsőrendű) Dirac-egyenlet is közvetlenül megoldható és a kapott megoldás ekvivalens a Volkov-megoldással. Megvizsgáljuk ezután a Volkov-állapotok teljességének kérdését (ez a perturbációszámításra történő alkalmazás szempontjából lényeges), végül meghatározzuk relativisztikus elektronoknak intenzív tér jelenlétében egy háttérpotenciálon történő szóródására (indukált fékezési sugárzás) a szórási hatáskeresztmetszetet [4].

Külső (klasszikus) síkhullám sugárzási térben mozgó spinor elektron relativisztikus hullámegyenlete a következő:

$$[i\partial - \epsilon A - \kappa]\psi = 0. \quad (7.1)$$

(A jelölések megegyeznek az 1. §-ban alkalmazott jelölésekkel.) Válasszunk most olyan koordinátarendszert, amelyben $k = \frac{\omega}{c}(1, 0, 1, 0)$ (a síkhullám az y -tengely mentén terjed) és $A = (0, A_1(\xi), 0, A_2(\xi))$, $\xi = x^0 - x^2 (= x^0 - y)$. Ebben a koordinátarendszerben a (7.1) Dirac-egyenlet így írható

$$\left[\alpha_x \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \epsilon A_x \right) + \alpha_y \left(-i \frac{\partial}{\partial y} \right) + \alpha_z \left(-i \frac{\partial}{\partial z} - \epsilon A_z \right) + \beta \kappa \right] \psi = i \frac{\partial}{\partial x_0} \psi. \quad (7.1a)$$

(Az α , β és γ^μ Dirac-mátrixok meghatározását és általunk használt reprezentációját az 1. Függelék tartalmazza.) (7.1) megoldását modulált síkhullám alakjában keressük, ahol a moduláció csak a külső tér ξ változójától függ:

$$\psi = e^{-ipx} \Phi(\xi) \quad (7.2)$$

(7.1a)-ba helyettesítve Φ -re a következő egyenlet adódik:

$$[\alpha_x(p_x - \epsilon A_x) + \alpha_y p_y + \alpha_z(p_z - \epsilon A_z) + \beta \kappa - p_0] \Phi = (1 - \alpha_y) i \Phi'. \quad (7.3)$$

Vesszővel a ξ szerinti deriválást jelöltük. A Dirac-mátrixok eddig használt standard reprezentációjában (7.3) egy csatolt differenciálegyenlet-rendszer, ui. a jobb oldalon α_y összecsatolja Φ különböző komponenseit. Lényegében ettől a csatolástól szabadultunk meg az 1. §-ban azon az áron, hogy másodrendűvé alakítottuk a Dirac-egyenletet. Választhatunk azonban más módszert is, mégpedig a (7.3) egyenletet oldjuk meg Majorana-reprezentációban. Vezessük be ekkor a következő unitér önadjungált mátrixot (Majorana [96]):

$$U_M = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_y + \beta), \quad U_M^{-1} = U_M^+ = U_M. \quad (7.4)$$

Könnyen beláthatjuk az alábbi összefüggéseket:

$$\begin{aligned}\alpha_{x,M} &= U_M \alpha_x U_M^{-1} = -\alpha_x & \alpha_{y,M} &= U_M \alpha_y U_M^{-1} = \beta \\ \alpha_{z,M} &= U_M \alpha_z U_M^{-1} = -\alpha_z & \beta_M &= U_M \beta U_M^{-1} = \alpha_y.\end{aligned}\quad (7.5)$$

Ezek felhasználásával (7.3) alakja Majorana-reprezentációban:

$$\begin{aligned}[\alpha_x(-p_x + \epsilon A_x) + \beta p_y + \alpha_z(-p_z + \epsilon A_z) + \alpha_y \kappa - p_0] \Phi_M = \\ = (1 - \beta) i \Phi'_M, \quad \Phi_M = U_M \Phi.\end{aligned}\quad (7.3a)$$

Ha bevezetjük Φ_M felső és alsó spinorkomponenseit, φ_M -et és χ_M -et $\left[\Phi_M = \begin{pmatrix} \varphi_M \\ \chi_M \end{pmatrix} \right]$, akkor (7.3a) egyszerű algebrai összefüggést ad φ_M és χ_M között

$$\varphi_M = \frac{(-p_x + \epsilon A_x) \sigma_x + (-p_z + \epsilon A_z) \sigma_z + \kappa \sigma_y}{p_0 - p_y} \chi_M. \quad (7.6a)$$

Ezt a (7.3a) alsó komponensére vonatkozó egyenletbe helyettesítve:

$$\chi'_M = -i \frac{2\epsilon A_p - \epsilon^2 A^2}{2np} \chi_M, \quad n^\mu = \frac{c}{\omega} k^\mu. \quad (7.6b)$$

Ennek megoldása:

$$\chi_M = \chi_{M,0} \exp \left\{ -i \frac{1}{2np} \int^\xi d\xi' (2\epsilon A_p - \epsilon^2 A^2) \right\}. \quad (7.7)$$

Itt $\chi_{M,0}$ konstans bispinor és felhasználtuk, hogy $p^2 = \kappa^2$. A Φ_M megoldás tehát

$$\Phi_M = \left[\frac{(-p_x + \epsilon A_x) \sigma_x + (-p_z + \epsilon A_z) \sigma_z + \kappa \sigma_y}{p_0 - p_y} \chi_{M,0} \right] e^{-i \int J_p(\xi) d\xi} \quad (7.8)$$

ahol $J_p(\xi)$ -t (1.6a)-ban definiáltuk. Az, hogy az így kapott megoldás fázisa megegyezik a Volkov-állapotéval, ránézésre is nyilvánvaló. A bispinor amplitúdók ekvivalenciáját pedig az alábbiakban igazoljuk. A Volkov-megoldás amplitúdója az előbbi koordináta-rendszerben:

$$\begin{aligned}u_p^{(V)} &= \left(1 + \frac{\epsilon n A}{2np} \right) u_p = \\ &= \left[1 + (1 + \alpha_y) \frac{\epsilon A_x \alpha_x + \epsilon A_z \alpha_z}{2(p_y - p_0)} \right] u_p.\end{aligned}\quad (7.9)$$

Majorana-reprezentációban ugyanez:

$$u_{p,M}^{(V)} = \left[1 + (1 + \beta) \frac{\epsilon A_1 \alpha_1 + \epsilon A_3 \alpha_3}{2(p_0 - p_y)} \right] u_{p,M}. \quad (7.9a)$$

Bevezetve $u_{p,M}$ felső és alsó spinorkomponenseit φ_M -et és χ_M -et, valamint felhasználva, hogy $u_{p,M}$ a

$$\begin{aligned} p_0 u_{p,M} &= [\alpha_M \mathbf{p} + \beta_M \kappa] u_{p,M} = \\ &= [-\alpha_x p_x + \beta p_y - \alpha_z p_z + \alpha_y \kappa] u_{p,M} \end{aligned} \quad (7.9b)$$

egyenletet elégíti ki, közvetlenül adódik, hogy (7.9) megegyezik a (7.8) megoldás bispinor amplitúdójával, a kétféle megoldás tehát unitér ekvivalens.

A teljesség szempontjából végülis tehát a következő megoldásrendszert kell megvizsgálnunk (vö. (1.8)):

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_p^{(\pm)}(x) = \left[1 \pm \frac{\epsilon k A(\xi)}{2kp} \right] u_p^{(\pm)} \otimes \\ &\otimes \exp \left\{ \mp i \left[p x + \int_{\xi}^{\xi} I_p^{(\pm)}(\xi') d\xi' \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

A felső előjel a pozitív frekvenciás, az alsó pedig a negatív frekvenciás megoldásokra vonatkozik, esetünkben

$$[p \mp \kappa] u_p^{(\pm)} = 0, \quad p^2 = \kappa^2, \quad p^\mu = (|p_0|, \mathbf{p}) \quad (7.10a)$$

és

$$I_p^{(\pm)}(\xi) = \frac{1}{2kp} [\pm 2\epsilon p A(\xi) - \epsilon^2 A^2(\xi)] \quad (7.10b)$$

Olyan választással éltünk tehát, amikor $\psi_p^{(-)}(x) = \psi_{-p}^{(+)}(x)$ (l. pl. Björken és Drell [15]).

Ahhoz, hogy a teljesség megfelelő definícióját megkapjuk, egy analógiából indulunk ki. A szabad részecske Dirac-egyenletének (amely (7.1)-ből $A=0$ helyettesítéssel adódik), megoldása:

$$\varphi_{pr}^{(\pm)}(x) = (2\pi)^{-3/2} \left(\frac{\kappa}{p_0} \right)^{1/2} u_{pr}^{(\pm)} e^{\pm i p x}. \quad (7.11)$$

A megoldások teljes ortonormált rendszert alkotnak, a teljességi összefüggés így írható fel:

$$\sum_{r=1}^2 \int d^3 p [\varphi_{pr}^{(+)}(x) \overline{\varphi_{pr}^{(+)}(x')} + \varphi_{pr}^{(-)}(x) \overline{\varphi_{pr}^{(-)}(x')}]_{x_0=x'_0} \gamma^0 = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (7.12)$$

A Volkov-állapotok szimmetriatulajdonságai szembetűnőbbek, ha fényszerű formalizmusra térünk át (2. Függelék). Fényszerű komponensekkel felírva (l. az (1.11)—(1.11a—b) egyenleteket is):

$$\begin{aligned} \psi_p^{(\pm)}(x) &= \left[1 \pm \frac{\epsilon}{2p_v} \gamma_v \gamma_i a_i(u) \right] u_p^{(\pm)} \otimes \\ &\otimes \exp \left\{ \pm i [u p_u + v p_v - x_i p_i + \int f_p^{(\pm)}(u) du] \right\} \end{aligned} \quad (7.13)$$

ahol

$$\begin{aligned} u &= x_v, \quad v = x_u, \quad a_i(u) = A_i(\xi), \\ f_p^{(\pm)}(u) &= \frac{\epsilon}{2p_v} [\pm 2p_i a_i(u) + \epsilon a_i(u) a_i(u)]. \end{aligned} \quad (7.13a)$$

Az állapotok $\left(a (2\pi)^{-3/2} \left(\frac{\kappa}{p_v} \right)^{1/2} \right)$ normálási faktoriall) ortogonálisak az $u = \text{const}$ háromdimenziós hipersíkon

$$\int \overline{\psi_{pr}^{(\pm)}}(uvx_i) \gamma_v \psi_{p'r}^{(\pm)}(uvx_i) dv d^2 x_i = \delta(p_v - p'_v) \delta^{(2)}(p_i - p'_i) \delta_{rr'}, \quad (7.14)$$

$$\int \overline{\psi_{pr}^{(\pm)}}(uvx_i) \psi_{p'r}^{(\pm)}(uvx_i) dv d^2 x_i = 0.$$

A (7.12) teljességi összefüggést úgy általánosíthatjuk, hogy az $x_0 = \text{állandó}$ közönséges háromdimenziós tér helyett tetszőleges háromdimenziós hipersíkra mondjuk azt ki. Vegyük észre, hogy az eddigiekben a Volkov-állapotoknál az idő szerepét az u változó játszotta. A külső tér-probléma szimmetriájával tehát az $u = \text{állandó}$ hipersík választása van összhangban. Defináljuk ezért a következő mennyiséget:

$$V(x, x') = \sum_{r=1,2} \int d^3 \tilde{p} [\psi_{pr}^{(+)}(x) \overline{\psi_{pr}^{(+)}(x')} + \psi_{pr}^{(-)}(x) \overline{\psi_{pr}^{(-)}(x')}] \gamma_v \quad (7.15)$$

ahol

$$\int d^3 \tilde{p} = \int_0^\infty dp_v \int_{-\infty}^\infty d^2 p_i. \quad (7.15a)$$

Könnyen beláthatók az alábbi tulajdonságok:

$$\int d^3 \tilde{x}' V(x, x') \psi_{pr}^{(\pm)}(x') = \psi_{pr}^{(\pm)}(x) \quad (7.16)$$

$$\int d^3 \tilde{x}' \overline{\psi_{pr}^{(\pm)}(x')} \overline{V(x, x')} = \overline{\psi_{pr}^{(\pm)}(x)},$$

ahol

$$\int d^3 \tilde{x} = \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dv d^2 x_i \quad (7.16a)$$

(7.16)-ból előtűnik V fizikai jelentése, V , ill. \bar{V} a Volkov-állapotok, illetve a Dirac-adjungált Volkov-állapotok propagátorai. Az is nyilvánvaló, hogy $V(u, u)$, ill. $\bar{V}(u, u)$ a megfelelő állapotok projektorai. A teljességhez tehát a $V(u, u) + \bar{V}(u, u)$ összeget kell vizsgálnunk. Helyettesítsük be (7.15)-be $\psi_{pr}^{(+)}$ konkrét alakját, (7.10)-et.

Felhasználva, hogy $\sum_r u_{pr}^{(\pm)} \overline{u_{pr}^{(\pm)}} = \frac{p \pm \kappa}{2\kappa}$ a spinekre vonatkozó összegzés elvégezhető.

(7.15) jobb oldalának negatív frekvenciás tagjában \tilde{p} -t $-\tilde{p}$ -vel helyettesítve

$$V(x, x')|_{u=u'} = \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_v}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{d^2 p_i}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{\epsilon k A(u)}{2kp} \right) \otimes$$

$$\otimes \frac{p + \kappa}{2p_v} \left(1 - \frac{\epsilon k A(u)}{2kp} \right) \gamma_v e^{-i(\tilde{x} - \tilde{x}') \cdot \tilde{p}}. \quad (7.17)$$

A \bar{V} -re vonatkozó kifejezés pedig csak A előjelében különbözik

$$\begin{aligned} \bar{V}(x, x')|_{u=u'} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_v}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 p_i}{(2\pi)^2} \gamma_v \left(1 - \frac{\epsilon k A(u)}{2kp}\right) \otimes \\ &\otimes \frac{p + \kappa}{2p_v} \left(1 + \frac{\epsilon k A(u)}{2kp}\right) e^{-i(\tilde{x} - \tilde{x}') \cdot \tilde{p}} \end{aligned} \quad (7.18)$$

(7.17) és (7.18) összege (figyelembe véve, hogy $p\gamma_v + \gamma_v p = 2p_v$):

$$[V + \bar{V}]_{u=u'} = \delta^{(3)}(\tilde{x} - \tilde{x}') - \frac{1}{2} i\kappa \gamma_v \in (v - v') \delta^{(2)}(x_i - x'_i) \quad (7.19)$$

ahol

$$\in(v) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ivp_v}}{p_v} dp_v \quad (7.19a)$$

(7.19)-ből kifejezhetjük $\delta^{(3)}(\tilde{x} - \tilde{x}')$ -t és behelyettesíthetjük egy tetszőleges $\psi(u\tilde{x})$ hullámfüggvény

$$\psi(u\tilde{x}) = \int d^3 \tilde{x}' \delta^{(3)}(\tilde{x} - \tilde{x}') \psi(u\tilde{x}') \quad (7.20)$$

előállításába. Eredményként a következőt kapjuk

$$\begin{aligned} \psi(u\tilde{x}) &= \sum_r \int d^3 \tilde{p} \{ [c_{pr}^{(+)}(u) + \gamma_v d_{pr}^{(+)}(u)] \psi_{pr}^{(+)}(u\tilde{x}) + \\ &+ [c_{pr}^{(-)}(u) + \gamma_v d_{pr}^{(-)}(u)] \psi_{pr}^{(-)}(u\tilde{x}) \} + \\ &+ \frac{1}{2} i\kappa \gamma_v \int_{-\infty}^{\infty} dv' \in(v - v') \psi(uv'x_i) \end{aligned} \quad (7.20a)$$

ahol

$$\begin{aligned} c_{pr}^{(\pm)}(u) &= \int d^3 \tilde{x} \bar{\psi}_{pr}^{(\pm)}(u\tilde{x}) \gamma_v \psi(u\tilde{x}) \\ d_{pr}^{(\pm)}(u) &= \int d^3 \tilde{x} \bar{\psi}_{pr}^{(\pm)}(u\tilde{x}) \psi(u\tilde{x}) \end{aligned} \quad (7.20b)$$

(7.20a) még tovább egyszerűsíthető, ha a jobb oldal utolsó tagjában ψ -t magával (7.20a)-val helyettesítjük és figyelembe vesszük, hogy $\gamma_v^2 = 0$. Ekkor

$$\begin{aligned} \psi(u\tilde{x}) &= \sum_r \int d^3 \tilde{p} \{ [c_{pr}^{(+)} + \gamma_v d_{pr}^{(+)}] \psi_{pr}^{(+)}(u\tilde{x}) + [c_{pr}^{(-)} + \gamma_v d_{pr}^{(-)}] \psi_{pr}^{(-)}(u\tilde{x}) + \\ &+ \frac{1}{2} i\kappa \gamma_v [c_{pr}^{(+)} \int_{-\infty}^{\infty} \in(v - v') \psi_{pr}^{(+)}(uv'x_i) dv' + c_{pr}^{(-)} \int_{-\infty}^{\infty} \in(v - v') \psi_{pr}^{(-)}(uv'x_i) dv'] \}. \end{aligned} \quad (7.20c)$$

A $\psi_{pr}^{(\pm)}(uv'x_i)$ Volkov-állapotok v' -től $e^{\pm iv'p_v}$ szerint függnak, ezért a (7.20c)-beli integrálok elvégezhetők $\in(v)$ (7.19a)-ban megadott alakját figyelembe véve:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv' \in(v - v') \psi_{pr}^{(\pm)}(uv'x_i) = \pm i \frac{2}{p_v} \psi_{pr}^{(\pm)}(u\tilde{x}) \quad (7.20d)$$

(7.20d)-t (7.20c)-be helyettesítve végül

$$\psi(u\tilde{x}) = \sum_r \int d^3\tilde{p} [b_{pr}^{(+)}(u)\psi_{pr}^{(+)}(u\tilde{x}) + b_{pr}^{(-)}(u)\psi_{pr}^{(-)}(u\tilde{x})] \quad (7.21a)$$

ahol

$$b_{pr}^{(\pm)}(u) = c_{pr}^{(\pm)}(u) + \gamma_v d_{pr}^{(\pm)}(u) \pm \frac{\kappa}{p_v} \gamma_v c_{pr}^{(\pm)}(u) \quad (7.21b)$$

(7.21) úgy tekinthető, mint a Volkov-állapotok szerinti sorfejtés, a sorfejtési együtthatókat (7.21a), illetve (7.20b) definiálják. Egy tetszőleges ψ hullámfüggvény fenti előállítását fogjuk az intenzív tér problémáknál felhasználni és, mint látni fogjuk, egy konkrét problémánál a sorfejtés tovább egyszerűsödik (általában csak $c_{pr}^{(+)}$ -t elegendő meghatározni).

Foglalkozzunk most tehát relativisztikus szabad elektronnak a $V(r)$ háttérpotenciálon intenzív klasszikus sugárzási tér jelenlétében történő szóródásával. A megfelelő Dirac-egyenlet:

$$[i\partial - \epsilon \underline{A} - \epsilon \underline{V} - \kappa]\psi = 0. \quad (7.22)$$

A megoldást keressük a

$$\psi = \psi_{qr}^{(+)} + \psi_k \quad (7.23)$$

alakban. Itt q és r a kezdeti (Volkov-) állapot paraméterei, a ψ_k korrekciós tag pedig teljes általánosságban a Volkov-állapotok (7.21) típusú szuperpozíciójaként írható fel. Behelyettesítve ψ így kapott alakját (7.22)-be, a következő egyenletre jutunk:

$$\sum_r \int d^3\tilde{p} \gamma_v i \left[\frac{db_{pr}^{(+)}(u)}{du} \psi_{pr}^{(+)} + \frac{db_{pr}^{(-)}(u)}{du} \psi_{pr}^{(-)} \right] = \epsilon \underline{V} \psi_{qr}^{(+)} + \epsilon \underline{V} \psi_k \quad (7.24)$$

(7.21a) szerint $\gamma_v b_{pr}^{(\pm)} = \gamma_v c_{pr}^{(\pm)}$ (mert $\gamma_v^2 = 0$), a kezdeti feltételek pedig így írhatók

$$c_{pr}^{(+)}(u < u_i) = 0 \quad \text{minden } p, r \text{-re} \quad (7.24a)$$

(7.24) jobb oldalán a második tag csak V -ben magasabb rendű kifejezéseket tartalmaz, ezért az intenzív térre vonatkozó alapfeltevésünk értelmében első közelítésben ezt a tagot elhanyagolhatjuk (Born-közelítés). Ezután a megmaradó tagokat balról skalárisan szorozzuk $\bar{\psi}_{p'r'}^{(+)}$ -vel és ekkor $c_{pr}^{(+)}(u)$ -ra közönséges differenciálegyenlet adódik:

$$i \frac{dc_{q'r'}^{(+)}}{du} = \int dv d^2x_i \bar{\psi}_{q'r'}^{(+)}(u\tilde{x}) \epsilon \underline{V} \psi_{qr}^{(+)}(u\tilde{x}). \quad (7.25)$$

Itt kihasználtuk a (7.14) ortogonalitási összefüggéseket. (7.25) azonnal integrálható

$$c_{q'r'}^{(+)}(u, u_i) = -i \epsilon \int_{u_i}^u du' \int dv d^2x_i \bar{\psi}_{q'r'}^{(+)}(u'\tilde{x}) \underline{V} \psi_{qr}^{(+)}(u'\tilde{x}). \quad (7.25a)$$

Behelyettesítve $c_{q'r'}^{(+)}$ fenti alakját (7.23)-ba és az (5.6) képletet alkalmazva, meghatározhatjuk a $qr \rightarrow q'r'$ folyamat átmeneti amplitúdóját. Ez $c_{q'r'}^{(+)}(u, u_i)$ -vel a következő kapcsolatban áll:

$$T_{fi} = c_{q'r'}^{(+)}(u \rightarrow \infty, u_i \rightarrow -\infty) \quad (7.26a)$$

vagyis

$$T_{fi} = -i \int d^4 x \bar{\psi}_{q'}^{(+)} \underline{V} \psi_q^{(+)} \quad (7.26)$$

Ez az egyenlet a nemrelativisztikus esetre kapott (6.11) kifejezés általánosítását jelenti. Mivel \underline{V} alakját nem specifikáltuk, bármilyen (elsőrendű) folyamat tárgyalására (pl. intenzív Compton-szórás) alkalmazható. Valóban (3.1)-ben éppen ebből a kifejezésből indultunk ki. Most azonban (7.26)-ot mélyebben megalapoztuk (a teljesség vizsgálatával) és tudjuk, hogy mögötte a (7.21) típusú kifejtés áll. A (7.24) egyenlet pedig (elvben) azt is lehetővé teszi, hogy \underline{V} -ben magasabbrendű korrekciókat határozzunk meg.

Alkalmazzuk (7.26)-ot arra az esetre, amikor $\underline{V} = \gamma^0 V(r)$ (skalárpotenciálra történő szórás) és

$$A_1(\xi) = a \cos \xi, \quad A_2(\xi) = a \sin \xi \quad (7.27)$$

azaz a külső tér cirkulárisan polarizált. Ekkor (7.26)-ból

$$T_{fi} = -i \int d^4 x \bar{u}_{q'}^{(+)} \left(1 - \frac{\epsilon k A}{2q' \cdot k} \right) \gamma^0 \left(1 + \frac{\epsilon k A}{2q \cdot k} \right) u_q^{(+)} \otimes V(r) \exp \{ i[(\bar{q}' - \bar{q})x + z \sin(kx + \varphi)] \}, \quad (7.28)$$

ahol

$$z = (z_1^2 + z_2^2)^{1/2}, \quad z_{1,2} = \epsilon a \left[\frac{(q' \cdot \epsilon_{1,2})}{q' \cdot k} - \frac{(q \cdot \epsilon_{1,2})}{q \cdot k} \right] \quad (7.28a)$$

$$\tan \varphi = \frac{z_2}{z_1}, \quad \bar{q} = q + \frac{\epsilon^2 a^2}{2q \cdot k} k, \quad \bar{q}' = q' + \frac{\epsilon^2 a^2}{2q' \cdot k} k.$$

A (7.28)-ban szereplő integrál kiszámításához ismét az

$$e^{iz \sin \theta} = \sum_n J_n(-z)^{-in\theta}$$

Fourier-kifejtést használjuk fel, ahol J_n az n -ed rendű Bessel-függvény. Az átmeneti mátrixelem ismét inkoherens tagok összegére bontható, ahol az n -ed rendű tag n foton abszorpciójának ($n > 0$), illetve emissziójának ($n < 0$) felel meg:

$$T_{fi} = \sum_n T_{fi}^{(n)} \quad (7.29)$$

$$T_{fi}^{(n)} = -2\pi i e^{-in\varphi} t_{fi}^{(n)} \delta(\bar{q}'_0 - \bar{q}_0 - nk_0)$$

ahol

$$t_{fi}^{(n)} = \epsilon V(\mathbf{Q}_n) (\bar{u}_{q'}^{(+)} M_n u_q^{(+)}),$$

$$V(\mathbf{Q}_n) = \int d^3 r V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{Q}_n \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{Q}_n = \bar{\mathbf{q}}' - \bar{\mathbf{q}} - n\mathbf{k}. \quad (7.29a)$$

Az M_n explicit kifejezésre pedig

$$M_n = \left(\gamma_0 + \frac{\epsilon^2 a^2}{4q_v q'_v} \gamma_v \right) J_n + \frac{\epsilon a}{4} \left(\frac{\gamma_0 \gamma_v}{q_v} + \frac{\gamma_v \gamma_0}{q'_v} \right) [\underline{\epsilon}^{(+)} J_{n+1} + \underline{\epsilon}^{(-)} J_{n-1}] \quad (7.29b)$$

$$\epsilon^{(+)} = \epsilon_1 \pm i\epsilon_2. \quad (7.29c)$$

A szórási hatáskeresztmetszetet $|t_{fi}^{(n)}|^2$ -ből a szokásos módon kaphatjuk meg. Az így kapott kifejezést átlagolva a kezdeti spinállapotokra és összegezve a végső spinállapotokra, végülis:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = & \frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} J_n^2(z) \frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(n)}}{d\Omega} \frac{1}{2} \left[1 + \frac{q_0 q'_0 + \mathbf{q}\mathbf{q}'}{\kappa^2} \right] \left(\frac{q'}{\kappa} \right) + \\ & + \frac{|\mathbf{q}'|}{|\mathbf{q}|} \frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(n)}}{d\Omega} \left(\frac{q'_0}{\kappa} \right) (\alpha_n v + \beta_n v^2 + \gamma_n v^3 + \delta v^4) \end{aligned} \quad (7.3)$$

ahol

$$\frac{d\sigma_{\text{Born}}^{(n)}}{d\Omega} = \left| \frac{\kappa}{2\pi} \in V(\mathbf{Q}_n) \right|^2. \quad (7.30a)$$

A V háttérpotenciálra történő, \mathbf{Q}_n impulzusváltozással járó szórás hatáskeresztmetszete Born-közelítésben, külső tér nélkül. Az $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n, \delta_n$ kifejezések a v intenzitásparaméter korlátos függvényei (v -től csak J_n és J_{n+1} -en keresztül függnek), ezenkívül az elektron négyesimpulzusától és a fény polarizációjától függnek. Pontos kifejezésük meglehetősen bonyolult, ezért mellőzzük. A (7.30) képletben az első tag a (6.12) egyenlet közvetlen általánosítása, a második pedig a spin-külső tér kölcsönhatásából ered. Elég széles intenzitástartományban az első taghoz képest $O\left(\frac{n\hbar\omega}{mc^2}\right)$ nagyságrendű korrekciót ad, ami optikai tartományban $n \lesssim 10^5$ esetén is még elhanyagolható.

Látjuk azt is, hogy az első tag megegyezik azzal, amit nem-dipól közelítésben várnánk a nemrelativisztikus elmélet alapján és $\mathbf{k} \rightarrow 0$ -ra pontosan visszaadja (6.12)-t. Éppen ezért érdekes lesz megvizsgálni a dipólközelítésen túlmenő nemrelativisztikus elméletet, ami a következő két fejezet tárgya.

8. § Optikailag indukált sávszerkezet és a nemrelativisztikus elmélet korlátai

Ebben a fejezetben nemrelativisztikus elektronok kvantummechanikai állapotait fogjuk vizsgálni külső sugárzási térben a Schrödinger-egyenlet alapján. Ezúttal azonban nem-dipól közelítésben kezeljük a problémát, azaz a külső tér explicit módon függ az idő és tér koordinátáktól. Az analízis alapjául [5] és [6] szolgál.

A vizsgálni kívánt probléma Schrödinger-egyenlete:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi) \right)^2 \psi \quad (8.1)$$

ahol

$$\mathbf{A} = a_0(\mathbf{e}_1 \cos \xi - \mathbf{e}_2 \sin \xi), \quad \xi = \omega t - \mathbf{k}\mathbf{x}, \quad \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n} \quad (8.1a)$$

\mathbf{e}_1 és \mathbf{e}_2 az EM-tér polarizációs vektorai, \mathbf{n} a terjedés irányába mutató egységvektor. Az egyszerűség kedvéért cirkulárisan polarizált külső teret vizsgálunk, ekkor ui. $\mathbf{A}^2 = a_0^2$. A jelölések egyébként megegyeznek az eddig alkalmazottal. (8.1) alakjából megsejthető, hogy a megoldást modulált síkhullám alakjában keressük, ahol a modu-

láció csak a ξ térváltozótól függ:

$$\psi_p(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)} f(\xi), \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (8.2)$$

Behelyettesítve (3.1)-be, $f(\xi)$ -re a következő közönséges differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{\hbar\omega}{2mc^2 \left(1 - \frac{v_{II}}{c}\right)} f'' + if' + \frac{\frac{e}{mc} \mathbf{A}\mathbf{p} - \frac{e^2 a_0^2}{2mc^2}}{\hbar\omega \left(1 - \frac{v_{II}}{c}\right)} f = 0, \quad v_{II} = \frac{n\mathbf{p}}{m}. \quad (8.3)$$

A második derivált együtthatója a fotonenergia és a párkeltési energia hányadosa, optikai frekvenciák esetén igen kicsi ($\sim 10^{-6}$). Ha ezért elhagyjuk (8.3) bal oldalán az első tagot, elsőrendű differenciálegyenletet kapunk, ami egzaktul megoldható. Ebben az esetben (8.3)-ból f egymásutáni deriváltjainak arányára a következő kifejezés adódik:

$$\left| \frac{f'}{f} \right| \sim \frac{\frac{e}{mc} \mathbf{A}\mathbf{p} - \frac{e^2 a_0^2}{2mc^2}}{\hbar\omega \left(1 - \frac{v_{II}}{c}\right)} \left(\sim \left| \frac{f''}{f'} \right| \right). \quad (8.3a)$$

Ha ez az arány elég nagy (nagy intenzitás esetén), akkor kompenzálhatja a második derivált együtthatójának kicsinységét. Nagy intenzitások esetén tehát az első tag is jelentős lehet és (8.3) egzakt megoldására lesz szükség.

Vegyük ehhez észre, hogy f' és f'' együtthatója konstans, végezzük el ezért a következő helyettesítést:

$$f(\xi) = \exp \left[-i \frac{2mc^2(1 - v_{II}/c)}{\hbar\omega} \frac{1}{2} \xi \right] g(\xi) \quad (8.4)$$

amivel (8.3)-ból kiküszöböljük az első deriváltat és $g(\xi)$ -re a következő egyenletet nyerjük:

$$g''(z) + (a - 2q \cos 2z) g(z) = 0. \quad (8.5)$$

Ez a Mathieu-típusú közönséges differenciálegyenlet standard alakja. (8.5)-ben a következő jelöléseket vezettük be:

$$a = \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^2 \left[\left(1 - \frac{v_{II}}{c} \right)^2 - \left(\frac{e}{c} \frac{a_0}{mc} \right)^2 \right] \quad (8.5a)$$

$$q = - \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{e}{c} \frac{a_0}{mc} \frac{p_{\perp}}{mc} \quad (8.5b)$$

$$p_{\perp} = [(\mathbf{e}_1 \mathbf{p})^2 + (\mathbf{e}_2 \mathbf{p})^2]^{1/2} \quad (8.5c)$$

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\mathbf{e}_2 \mathbf{p}}{\mathbf{e}_1 \mathbf{p}}, \quad z = \frac{1}{2} (\xi - \alpha). \quad (8.5d)$$

Az is könnyen belátható, hogy p_{\perp} mozgásállandó, mert a $\hat{\mathbf{p}}_1 = \mathbf{e}_1 \cdot \hat{\mathbf{p}}$ és $\hat{\mathbf{p}}_2 = \mathbf{e}_2 \cdot \hat{\mathbf{p}}$ operátorok kommutálnak a kiindulási Hamilton-operátorral. A (8.5) egyenletben tehát a q paramétert a kezdeti feltételek teljesen meghatározzák, az egyetlen szabad paraméter a , illetve az ebben szereplő v_{\parallel} . (8.5) általános megoldása (Arscott [97]):

$$g(z) = Ae^{-\mu z} \Phi + Be^{\mu z} \Phi(-z). \quad (8.6)$$

Itt A és B állandók, μ az ún. karakterisztikus exponens, $\Phi(z)$ pedig π -periodikus függvény. A karakterisztikus exponens általában komplex: $\mu = \delta + i\beta$. Ha $\delta \neq 0$, a $g(z)$ megoldás vagy $z \rightarrow +\infty$, vagy $z \rightarrow -\infty$ esetén instabil. Ezért fizikailag értelmes megoldás esetén $\delta = 0$ -t kell megkövetelnünk. Mivel δ a (8.5) egyenlet paramétereinek függvénye, $\delta = \delta(a, q)$, ez végső soron egy a és q közötti összefüggést jelent. (8.6)-ot (8.5)-be helyettesítve μ -re vonatkozó sajátértékegyenletet kapunk:

$$ch\pi\mu = 1 - 2\Delta(0) \sin^2 \frac{1}{2} \pi \sqrt{a}, \quad (8.7)$$

ahol $\Delta(0)$ végtelen tridiagonális determináns:

$$\Delta(i\mu) = \begin{vmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \gamma_{-2} & 1 & \gamma_{-2} \\ & \gamma_0 & 1 & \gamma_0 \\ & & \gamma_2 & 1 & \gamma_2 \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix} \quad (8.7a)$$

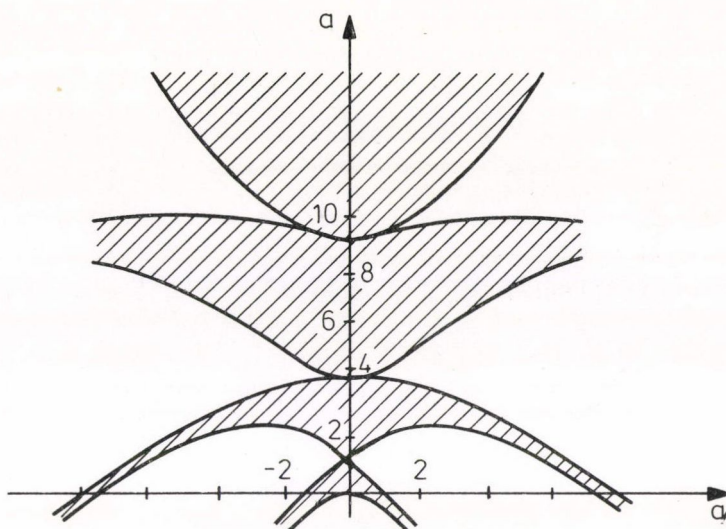
és

$$\gamma_{2r} = \frac{q}{[2r - i\mu]^2 - a}. \quad (8.7b)$$

A (8.7) egyenlet csak numerikusan oldható meg és a megoldás adja meg a $\mu = \mu(a, q)$ függvényt. Az a, q paraméterek bizonyos értékeire $\text{Re } \mu = \delta = 0$. Ezek az összetartozó értékpárok adják a stabil megoldásokat. Ennek megfelelően az $a-q$ sík stabil és instabil tartományokra osztható, ezt a stabilitási diagramot mutatja az 5. ábra.

Mivel q -t egy adott kísérlet esetén a bemenő paraméterek (intenzitás, frekvencia, transzverz impulzus) teljesen meghatározzák, az 5. ábra alapján azt várnánk, hogy a lehetséges értékei sávokat alkotnak. A megfelelő relatisztikus hullámegyenletek azonban síkhullám külső tér esetén nem vezetnek sávszerkezetre és így a belőlük nyerhető nemrelativisztikus limit sem. A probléma feloldása abban rejlik, ha észrevesszük, hogy amikor (8.3)-ban megtartjuk a második deriváltat tartalmazó tagot, akkor valójában relativisztikus korrekciókat tartunk meg. Ez a tag ugyanis a v intenzitás paraméter $v \sim 1$ körüli értékénél válik összemérhetővé az első deriválttal. Azt viszont már a klasszikus mechanika mozgásegyenletének megoldásánál láttuk

(l. (1.36)), hogy $\left| \frac{v}{c} \right| \simeq v$, azaz ilyen intenzitásértékek mellett mindenképpen relativisztikus elméletre van szükség. A fenti sávszerkezet fellépése tehát annak a következménye, hogy a nemrelativisztikus Schrödinger-egyenletet alkalmazhatósági határain kívül alkalmaztuk, azaz olyan problémánál, amelynél v/c egységnyivé válik.



5. ábra. A Mathieu-egyenlet stabilitási diagramja. A stabil tartományok árnyékoltak; $a-q$ sík többi része instabil.

Ha viszont elhanyagoljuk (8.3)-ban az f'' -s tagot, a fennmaradó elsőrendű differenciálegyenlet egzaktul megoldható és eredményül az

$$f(\xi) = f(0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^\xi d\xi' \left[\frac{e}{mc} \mathbf{A} \mathbf{p} - \frac{e^2 a_0^2}{2mc^2} \right] \right\} \quad (8.8)$$

függvényt kapjuk. Ez egyben a Volkov-megoldás nemrelativisztikus határesete is. Ha a 6.§-ban a nemrelativisztikus indukált fékezési sugárzás hatáskeresztmetszetének meghatározására szolgáló eljárásban az itteni (8.8) hullámfüggvényt használjuk, akkor a (7.30) relativisztikus kifejezés első tagját kapjuk vissza. (8.8) és az egzakt (8.6) megoldás kapcsolatát a következő módszerrel érthetjük meg. $\Phi(z)$ π szerint periodikus, ezért e^{2irz} szerint sorbfejthető (r egész szám). Az $e^{\mu z} \Phi(z)$ Mathieu-függvényre tehát:

$$e^{\mu z} \Phi(z) = e^{\mu z} \sum_{r=-\infty}^{\infty} c_{2r} e^{2irz}. \quad (8.9)$$

Behelyettesítve ezt a (8.5) Mathieu-egyenletbe, c_{2r} -re a következő rekurziós összefüggést kapjuk:

$$\frac{(2r - i\mu)^2 - a}{-\frac{1}{2}q} c_{2r} = c_{2r-2} + c_{2r+2}. \quad (8.10)$$

A mondottak alapján, optikai frekvenciákon $a \gg 1$, $\left| \frac{a}{q} \right| \gg 1$. Ekkor $-i\mu = \sqrt{a}$, és bevezetve a $c_{2r} = d_r$ jelölést:

$$\frac{2r}{-\frac{1}{4} q/\sqrt{a}} d_r = d_{r-1} + d_{r+1} \quad (8.11)$$

Ez éppen a Bessel-függvényekre vonatkozó rekurziós összefüggés, megoldása (Abramowitz és Stegun [98]):

$$c_{2r} = J_r(u), \quad u = \frac{ea_0 p_{\perp}}{m\hbar\omega(1-v_{\parallel}/c)} \quad (8.12)$$

(8.8) Fourier-kifejtésének együtthatói megegyeznek (8.12)-vel. Megemlítjük azt is, hogy ha cirkuláris polarizáció helyett lineárisal számoltunk volna, akkor a (8.5) Mathieu-egyenlet helyett az általánosabb Hill-típusú egyenletre jutnánk. Ez azonban a sávszerkezetre vonatkozó észrevételeinket nem befolyásolja.

Itt említjük meg azt is [5], hogy (8.8) alapján meghatározható az elektronok impulzus-eloszlás függvénye, ami a külső tér jelenlétében végzett szórás kísérletekkel ([67], [68]) közvetlen kapcsolatban áll. Az eloszlásfüggvény értéke a $\mathbf{p} + n\hbar\mathbf{k}$ (n egész) értékeknél jelentős, értéke a (8.12) Bessel-függvény négyzete. A fékezési sugárzás hatáskeresztmetszetére vonatkozó (6.12) és (7.30) formulákban éppen ez a tényező írja le a külső tér nélküli hatáskeresztmetszetek korrekcióját.

9. § Elektron-elektron szórás intenzív térben

A 4. §-ban áttekintettük a külső térbeli Møller-szórás elméletét. Az ott mondottak alapján kísérleti szempontból legérdekesebb a nemrelativisztikus energiatartomány. Ennek ellenére korábban a folyamat nemrelativisztikus analízise hiányzott, aminek oka az, hogy a rendelkezésre álló nemrelativisztikus hullámfüggvények nem mentek túl a dipólközelítésen. Dipólközelítésben pedig — mint látni fogjuk — a külső tér nem befolyásolja az elektron-elektron szórási képet. A jelen fejezetben a külső térbeli elektron-elektron szórás dipól-közelítésen túlmenő nemrelativisztikus elméletét tárgyaljuk [7] és [8] alapján.

A vizsgálandó probléma Schrödinger-egyenlete

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (9.1)$$

A H Hamilton-operátor két részre bontható

$$H = H_0 + V(r), \quad (9.2)$$

ahol

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi_1) \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}_2 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi_2) \right)^2 \quad (9.2a)$$

és

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \quad (9.2b)$$

H_0 a külső térrel kölcsönható szabad elektronok Hamilton-operátora, $V(\mathbf{r})$ az elektron-elektron kölcsönhatást leíró Coulomb-potenciál. Az \mathbf{A} vektor potenciál cirkulárisan polarizált síkhullám külső teret ír le:

$$\mathbf{A}(\xi_{1,2}) = a(\mathbf{e}_1 \cos \xi_{1,2} - \mathbf{e}_2 \sin \xi_{1,2}), \quad \xi_{1,2} = \omega t - \mathbf{k}\mathbf{x}_{1,2}. \quad (9.2c)$$

Először is megjegyezzük, hogy dipólközelítésben ($\mathbf{k}=0$) a (9.1) Schrödinger-egyenlet szeparálható tömegközépponti és relatív koordinátákban ([2] és [7]). A külső térrel való kölcsönhatás ekkor a tömegközépponti mozgásban jelenik meg, az elektron-elektron kölcsönhatás pedig a relatív mozgásban. Ezért a szórásfolyamat ekkor független a külső tértől. Ettől eltérést csak a dipólközelítés elhagyásával kapunk.

Az intenzív tér számítások eddigiekben követett módszere szerint $V(r)$ -et perturbációként kezeljük és a H_0 rész megoldásait választjuk bázisként a perturbációszámításhoz. Mivel H_0 két egy-elektron Hamilton-operátor összege, a perturbálatlan megoldást szorzatalakban vehetjük fel:

$$\psi^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \psi^0(\mathbf{x}_1, t)\psi^0(\mathbf{x}_2, t) \quad (9.3)$$

ahol most $\psi^0(\mathbf{x}, t)$ (8.2) alakú hullámfüggvény. Az előző fejezet alapján nemrelativisztikus esetben a legkonzekvensebb választás a (8.2)-beli $f(\xi)$ -re (8.8).

Az átmeneti amplitúdó (5.6)-ban megadott kifejezésébe helyettesítve ψ^0 fenti alakját, $V(r)$ -ben első rendben:

$$T_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_f^{0*}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) V(\mathbf{r}) \psi_i^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t), \quad (9.4)$$

ahol

$$\psi_i^0 = \psi_{p_{1i}}(\mathbf{x}_1, t) \psi_{p_{2i}}(\mathbf{x}_2, t) \quad (9.4a)$$

és hasonló kifejezés érvényes a végállapot hullámfüggvényére is. Végezzük el $\psi_p(\mathbf{x}, t)$ exponenciában a (8.8)-ban jelölt integrálást és helyettesítsük az így kapott alakokat (9.4)-be. Térjünk át ezután tömegközépponti $\left(\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)\right)$ és relatív ($\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$)

koordináták szerinti integrálásra, az $\exp \left\{ \begin{matrix} iz_1 \sin \\ iz_2 \cos \end{matrix} (\omega t - \mathbf{k}\mathbf{R}) \right\}$ kifejezésére pedig alkalmazzuk a már többször látott Fourier-sorfejtést. Ezen hosszadalmas, de elemi számítások után az idő szerinti és a tömegközépponti koordináták szerinti integrálás elvégezhető, és a következő alakot kapjuk:

$$T_{fi} = \sum_n T_{fi}^{(n)}, \quad (9.5)$$

ahol

$$T_{fi}^{(n)} = -2\pi i \delta(\tilde{E}_f - \tilde{E}_i + n\hbar\omega) \delta^{(3)}(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i + n\hbar\mathbf{k}) t_{fi}^{(n)} \quad (9.5a)$$

és

$$t_{fi}^{(n)} = (2\pi\hbar)^{-3} e^{-in(\varphi + \pi/2)} \int d^3r V(r) J_n \left(z_1 \sin \frac{1}{2} \mathbf{k}\mathbf{r} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{A}\mathbf{p}\mathbf{r}}. \quad (9.5b)$$

Itt bevezettük a következő jelöléseket:

$$\tilde{E} = E + \frac{e^2 a^2}{2mc^2 \omega'} \omega, \quad \omega' = \omega \left(1 - \frac{\mathbf{k} \mathbf{p}}{m\omega}\right) \quad (9.6a)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2), \quad \Delta \mathbf{p} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f \quad (9.6b)$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\mathbf{e}_2 \Delta \mathbf{p}}{\mathbf{e}_1 \Delta \mathbf{p}}, \quad z_1 = \frac{2ea}{m\hbar\omega} [(\mathbf{e}_1 \Delta \mathbf{p})^2 + (\mathbf{e}_2 \Delta \mathbf{p})^2]^{1/2} \quad (9.6c)$$

J_n pedig az n -edrendű Bessel-függvény.

(9.5a)-ból a következő megmaradási törvények olvashatók le:

- \mathbf{P} transzverzális komponensei megmaradó mennyiségek,
- \mathbf{P} longitudinális komponense a szórási folyamat során a fotonimpulzus egész számú többszörösével ($n\hbar\mathbf{k}$) változhat,
- az energia az intenzitással arányosan eltolódik, az eltolódás (ω' -n keresztül) függ az impulzustól. Ezenkívül a szórási folyamat során az energia a fotonenergia egész számú többszörösével ($n\hbar\omega$) változhat.

A fenti megmaradási törvények kinematikai szempontból teljesen meghatározzák a szórási folyamatot. (9.6a)-ban ω' -t v/c -ben elsőrendig sorbafejtve:

$$\tilde{E}_{i,f} = \tilde{E}_{1i,f} + \tilde{E}_{2i,f} = \frac{\mathbf{p}_{i,f}^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_{i,f}^2}{m} + 2 \frac{e^2 a^2}{2mc^2} + \frac{e^2 a^2}{2mc^2} \frac{\mathbf{k} \mathbf{p}_{i,f}}{m\omega}. \quad (9.7)$$

Az energiamegmaradás követelményéből

$$\frac{\mathbf{p}_f^2}{4m} - \frac{\mathbf{p}_i^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_f^2}{m} - \frac{\mathbf{p}_i^2}{m} + \frac{e^2 a^2}{2mc^2} \frac{\mathbf{k}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)}{m\omega} + n\hbar\omega = 0. \quad (9.8)$$

A $2 \frac{e^2 a^2}{2mc^2}$ homogén eltolódás a különbségből kiesik, csak az eltolódás inhomogén része, $\frac{e^2 a^2}{2mc^2} \frac{\mathbf{k} \mathbf{p}_{i,f}}{m\omega}$ ad el nem tűnő járulékot. Felhasználva a $\mathbf{p}_f = \mathbf{p}_i - n\hbar\mathbf{k}$ tömegközépponti impulzus megmaradási törvényt, (9.8) a következő alakra hozható:

$$\frac{\mathbf{p}_f^2}{m} - \frac{\mathbf{p}_i^2}{m} + n\hbar\omega \left(1 - \frac{e^2 a^2}{2(mc^2)^2} - \frac{V_i''}{c}\right) + n^2 \frac{\hbar^2 \omega^2}{4mc^2} = 0, \quad (9.9)$$

$$V_i'' = c \frac{\mathbf{k} \mathbf{p}_i}{m\omega}.$$

A kételektron-rendszer mint egész vesz fel tehát impulzust (az impulzus-változás a tömegközépponti mozgásban jelenik meg). (9.9) pedig azt jelenti, hogy az energiafelvétel (fotonabszorpció és emisszió) a relatív mozgásban történik. A vizsgált problémánál ez jelenti ugyanis a belső szabadsági fokot. Az impulzusmegmaradás következtében fellépő Doppler-eltolódás, visszalökődési energia és intenzitásfüggő energia-eltolódás szintén a relatív mozgásban jelentkeznek. Dipólközelítés ($\mathbf{k}=0$) esetén (9.5b)-ből $J_n(0) = \delta_{n,0}$ felhasználásával azonnal látszik, hogy a szórás a szokásos

térmentes szórási folyamatra redukálódik. Különböző előjelű töltések szórása esetén a fő járulékot a $\mathbf{k}=0$ eset már megadta, mint azt a nemlineáris fékezési sugárzás esetén már láttuk és ehhez a $\mathbf{k}\neq 0$ csak kis korrekciót jelentett. Most éppen a $\mathbf{k}\neq 0$ feltevésből határozható meg a fő járulék. A külső tér tehát mintegy különbséget tesz a szóródó részecskék töltésének relatív előjele között.

A következőkben röviden kitérünk arra, hogy a spin figyelembevétele mennyiben módosítja a fenti szórási képet. Mivel az elektron Fermi-részecske, a kételektron-hullámfüggvény a két részecske felcserélésére nézve antiszimmetrikus. Mivel a (9.2) Hamilton-operátor a spinváltozókra nem hat, a teljes hullámfüggvény egy spinfüggő és egy koordinátafüggő tényező szorzatára bontható. A két részecske spinállapotát leíró hullámfüggvény lehet szimmetrikus (triplet állapot), vagy antiszimmetrikus (szinglet állapot). A megfelelő koordinátafüggő rész triplet állapotban antiszimmetrikus, szinglet állapotban szimmetrikus ahhoz, hogy a teljes hullámfüggvény megfelelő szimmetriáját biztosítsuk. Az átmeneti amplitúdó orbitális része is vagy szimmetrikus ($t_{fi,s}^{(n)}$), vagy antiszimmetrikus ($t_{fi,a}^{(n)}$). Közvetlen számolással belátható, hogy $t_{fi,s,a}^{(n)}$ (9.5b)-vel a következő kapcsolatban van:

$$t_{fi,s}^{(n)} = t_{fi}^{(n)}(\Theta) + t_{fi}^{(n)}(\pi - \Theta), \quad t_{fi,a}^{(n)} = t_{fi}^{(n)}(\Theta) - t_{fi}^{(n)}(\pi - \Theta) \quad (9.10)$$

ahol Θ a relatív mozgáshoz tartozó szórási szög. A kételektron-rendszernek három szimmetrikus és egy antiszimmetrikus spinállapota van, polarizálatlan elektronok esetén ezek egyformán valószínűek. A szórási hatáskeresztmetszetben ezért az antiszimmetrikus orbitális rész súlya háromszorosa lesz a szimmetrikusénak:

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \frac{1}{4} \frac{d\sigma_s^{(n)}}{d\Omega} + \frac{3}{4} \frac{d\sigma_a^{(n)}}{d\Omega}. \quad (9.11)$$

A továbbiakban csak a $t_{fi}^{(n)}(\Theta)$ (9.5b)-ban megadott alakjával foglalkozunk, mert a szimmetrizálás (9.10) alapján csak $\Theta \rightarrow \pi - \Theta$ cserét jelent és lényegileg új információt nem ad.

A folyamat dinamikájának vizsgálatához a (9.5b) szórási amplitúdót olyan alakra transzformáljuk, amelyről a belső rezonanciákat mutató szerkezet közvetlenül leolvasható. Ehhez használjuk fel a Bessel-függvények alábbi integrálegelőállítását (Abramowitz és Stegun [98]):

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\theta + ix \sin \theta} d\theta.$$

Esetünkben $x = z_1 \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$. x ezen kifejezését behelyettesítve és

$$e^{iz_1 \sin \Theta \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{it} e^{i \frac{m}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

szerint Fourier-sorba fejtvé:

$$t_{fi}^{(n)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-in(\varphi + \pi/2)} \sum_m \int_{-\pi}^{\pi} d\Theta e^{-in\Theta} J_m(z_1 \sin \Theta) V(\mathbf{Q}_m), \quad (9.12)$$

ahol az eddigiekhez hasonlóan

$$V(\mathbf{Q}_m) = \int d^3r V(\mathbf{r}) e^{i \frac{t}{\hbar} \mathbf{Q}_m \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{Q}_m = \Delta \mathbf{p} + (m/2) \hbar \mathbf{k} \quad (9.12a)$$

(9.12)-ben a Θ -szerinti integrál elvégezhető (Gradshtein és Ryzhik [99]) és végeredményben $\left(m \text{ helyett az új } r = \frac{m-n}{2} \text{ összegzési indexre áttérve}\right) t_{fi}^{(n)}$ következő alakjára jutunk:

$$t_{fi}^{(n)} = e^{-in\varphi} \frac{16\pi e^2}{\hbar} \sum_r \frac{J_r\left(\frac{z_1}{2}\right) J_{r+n}\left(\frac{z_1}{2}\right)}{[2\Delta p + (2r+n)\hbar k]^2} \quad (9.13)$$

$t_{fi}^{(n)}$ -re most két, látszólag különböző, de egymással ekvivalens kifejezésünk van, (9.5b) és (9.13). Az első alkalmasabb numerikus számolásra, a második viszont explicit rezonanciaszerkezetet mutat. A szokásos Coulomb-rezonanciától eltekintve ($\Delta p=0$), azt várjuk, hogy új rezonanciákat találunk, amikor $2\Delta p + (2r+n)\hbar k=0$. Ez azonban nem egészen így van, ekkor ui. $z_1=0$ és (9.13) számlálója is eltűnik, kivéve az $r=n=0$ esetet. Ezért az $n=0$ (rugalmas szórás) esetében vizsgáljuk meg (9.13)-at, illetve a belőle adódó

$$\frac{d\sigma^{(0)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} \sum_{r=0, \pm 1, \dots} \left[\frac{2me^2}{\hbar^2} \right]^2 J_r^4\left(\frac{z_1}{2}\right) \left[\frac{2\Delta p}{\hbar} + rk \right]^{-4} \quad (9.14)$$

hatáskeresztmetszetet. A (9.9) energiamegmaradási képletből látszik, hogy az n -edrendű folyamat során minimálisan létrejövő relatív impulzusváltozás

$$2|\Delta p| = n \frac{\hbar\omega}{(p/m)} = n \frac{\hbar\omega}{V} \gg (2r+n)|\hbar k| \quad (9.9a)$$

v a relatív sebesség és $|2r| \sim n = \mathcal{O}(1)$. Azaz $n \neq 0$ esetén (9.13) nevezőjére a rezonanciafeltétel nem teljesülhet, rezonanciát mindenképpen csak a rugalmas csatornában várhatunk. A rugalmas szórás $d\sigma_0$ hatáskeresztmetszete most

$$d\sigma_0 = d\sigma_{00} + d\sigma_{01} + d\sigma_{0-1} + \dots \quad (9.14a)$$

alakban írható, ahol $d\sigma_{00}$ és $d\sigma_{0\pm 1}$ a (9.14) összeg $r=0, \pm 1$ -hez tartozó összetevőinek felel meg. Az egyszerűség kedvéért vizsgáljunk olyan geometriát, amikor \mathbf{p}_{1i} és \mathbf{p}_{1f} a \mathbf{k} , \mathbf{e}_1 síkban fekszenek (6. ábra).

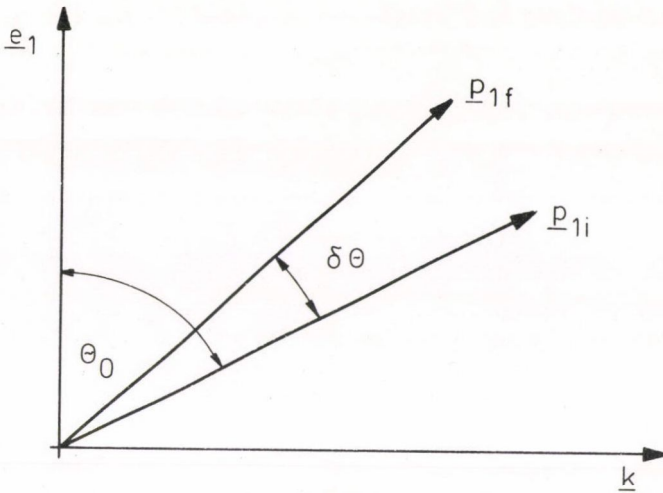
Ha feltesszük, hogy z_1 (9.14)-ben kicsi, akkor a Bessel-függvényeket (9.14)-ben az argumentumuk szerint sorbafejthetjük és (a numerikus tényezőktől eltekintve) a következő kifejezésre jutunk:

$$\frac{d\sigma_{0\pm 1}}{d\Omega} \simeq \frac{\sin^4 \Theta_0 (\delta\Theta)^4}{\left[\left(\delta\Theta \mp \frac{\hbar k}{p_{1i}} \cos \Theta_0 \right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{p_{1i}^2} \sin^2 \Theta_0 \right]^2}. \quad (9.15)$$

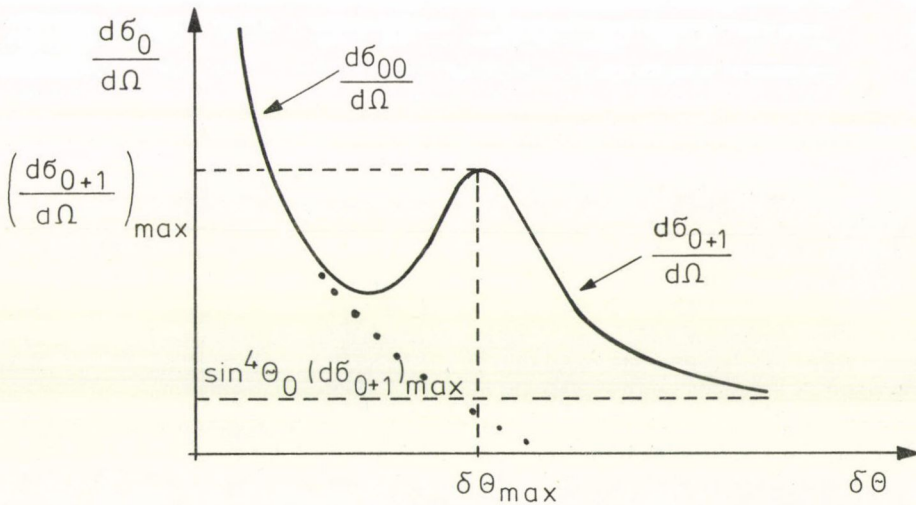
Itt Θ_0 p_{1i} -nek az \mathbf{e}_1 polarizációs iránnyal bezárt szöge, $\delta\Theta$ pedig a szórási szög. (9.15) rezonancia alakú, maximumát a

$$\delta\Theta'_{\max} = (\delta\Theta_{\mp 1})_{\max} = \pm \frac{\hbar k/p_{1i}}{\cos \Theta_0} \quad (9.15a)$$

helyen éri el, maximális értéke $\cos^4 \Theta_0$. A rezonancia véges szélességű és maximuma is véges, ellentétben a [90]–[92]-ben talált eredményekkel, így nincs szükség a sugárzási korrekciók figyelembevételére ahhoz, hogy a hatáskeresztmetszetet végessé



6. ábra. Az elektron-elektron szórás geometriája



7. ábra. A szórás hatáskeresztmetszet viselkedése a $\delta\theta$ szórási szög függvényében. $\frac{d\sigma_{0+1}}{d\Omega}$ aszimptotikus értéke $\sin^4 \theta \left(\frac{d\sigma_{0+1}}{d\Omega} \right)_{\max}$. A maximumhelynél $\left(\frac{d\sigma_{0+1}}{d\Omega} \right) / \left(\frac{d\sigma_{00}}{d\Omega} \right)$, a rugalmas rezonáns szórás és a rugalmas nemrezonáns szórás aránya szokásos intenzitásértékeknél 10^2 is lehet

tegyük. A szórás hatáskeresztmetszet kvalitatív viselkedését mutatja a $\delta\theta$ szórási szög függvényében a 7. ábra.

A fenti rezonanciák megfigyeléséhez igen kisenergiájú, monokromatikus és kis divergenciájú elektronnyaláb szükséges. Ekkor nagy szögfelbontás esetén elvileg megfigyelhető a jóslott effektus.

A fejezet befejezéséül még egyszer térjünk vissza a $t_{fi}^{(n)}$ szórási amplitúdó két-féle előállításához. (9.13) tette lehetővé a rezonanciaszerkezet felismerését, (9.5b) pedig — azonkívül, hogy numerikus számításokhoz megfelelőbb — a rezonancia-szerkezet egy érdekes interpretációját teszi lehetővé. Az n -edrendű szórási folyamatot ugyanis (9.5b) szerint a $V_{\text{eff}} = V(r)J_n\left(z_1 \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \mathbf{r}\right)$ effektív potenciálon létrejövő szórásának tekinthetjük. Először is világos, hogy az effektus teljes egészében a külső tér nem-dipól jellegéből származik, a $\mathbf{k}=0$ esetben V_{eff} a Coulomb-potenciálra redukálódik. A z_1 , intenzitásparaméter nem túl nagy értékeinél $J_n\left(z_1 \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \mathbf{r}\right)$ az \mathbf{r} távolságtól függetlenül pozitív. Ha azonban z_1 -et (azaz az intenzitást) növeljük, az effektív potenciál vonzóvá válik ($J_n < 0$) bizonyos \mathbf{r} értékek esetén. Más szavakkal az elektronok közötti fotoncsere párképződéshez vezethet, hasonlóan ahhoz, mint a szupravezető anyagokban az elektron-fonon kölcsönhatás. Az effektív potenciál kötött állapotainak a szórási amplitúdóban rezonanciák felelnek meg. Az, hogy az elektronok közötti effektív kölcsönhatás intenzív tér jelenlétében vonzó is lehet, már korábban is felmerült (Oleinik [90]), az effektív potenciál egyszerű, analitikus alakjának meghatározása azonban itt szerepel először.

10. § Nemlineáris szórásfolyamatok kvantált sugárzási térben

Az értekezés befejező részében a szabad elektron és síkhullám sugárzási tér (fény) kölcsönhatásának egyik fontos modelljét vizsgáljuk meg. A modellben az elektront kvantummechanika segítségével írjuk le, a sugárzási tér adott módusát reprezentáló vektorpotenciált pedig kvantált térmennyiségnek tekintjük. Az eddigi szemiklasszikus tárgyalás során azt tapasztaltuk, hogy az eredményeket foton-emissziós és abszorpciós folyamatként értelmezhetjük, annak ellenére, hogy a számításokban klasszikus térrel történt a kölcsönhatás. Az itt vizsgált modell ezen intuitív fotonkép megalapozását adja, ezen túlmenően pedig a folyamatok során bekövetkező móduskiürülést is vizsgálhatjuk segítségével. Külön vizsgáljuk a nem-relativisztikus és a relativisztikus esetet. Mindkét esetben meghatározzuk az „elektron + kvantált módus” rendszer egzakt kvantummechanikai sajátállapotait és ezek segítségével határozzuk meg nemrelativisztikus esetben a fékezési sugárzás hatás-keresztmetszetét ([9]), relativisztikus esetben pedig a Compton-effektus hatás-keresztmetszetét ([10]). Az itt követett eljárás az 1. táblázat III. rovatába tartozik és átmeneti helyet foglal el a kvantum-elektrodinamika és a szemiklasszikus tárgyalás-mód között. Megmutatjuk, hogy az így nyert eredmények a nagy intenzitás, kis móduskiürülés esetén átmennek a szemiklasszikus eredményekbe, nagy móduskiürülés esetén pedig azoktól jelentősen eltérhetnek.

10.1. Nemrelativisztikus tárgyalás

Nemrelativisztikus esetben a következő Schrödinger-egyenlet írja le szabad elektronok és kvantált sugárzási tér kölcsönhatását:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (10.1)$$

Alkalmazzuk D_σ^{-1} -et (10.5)-re, ekkor

$$\mathcal{H}\chi = E\chi, \quad \chi = D_\sigma^{-1}\varphi, \quad \mathcal{H} = D_\sigma^{-1}HD_\sigma. \quad (10.5a)$$

Ha a σ mennyiséget a

$$\sigma = \frac{e\alpha}{\hbar\Omega mc} \hat{\mathbf{p}}\epsilon^* \quad (10.6b)$$

összefüggésnek megfelelően választjuk, akkor a (10.6a) eltolási tulajdonságok alapján a transzformált Hamilton-operátor:

$$\mathcal{H} = D_\sigma^{-1}HD_\sigma = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+a + \frac{1}{2} - \sigma^+\sigma \right). \quad (10.5b)$$

A D_σ^{-1} transzformáció segítségével tehát az a -ban és a^+ -ben lineáris kölcsönhatási részt kiküszöböltük a Hamilton-operátorból. Ezért (10.5a) megoldását kereshetjük $\chi = |p\rangle|n\rangle$ alakban, ahol $|p\rangle$ a szabad elektron impulzussaját-állapota (p impulzussal) $|n\rangle$ pedig a szabad módus sajátállapota (szám-, v. Fock-állapot). (10.5) megoldása ekkor

$$\varphi = \varphi_{p,n} = |p\rangle D_\sigma |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (10.7)$$

Az energia-sajátértékek pedig (10.5b)-ből azonnal leolvashatók:

$$E = E(p, n) = \frac{p^2}{2m} + \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} - |\sigma|^2 \right) \quad (10.7a)$$

σ itt már nem operátor, hanem c -szám, (10.6b) mátrixeleme impulzusreprezentációban. D_σ unitaritása miatt a φ_{pn} állapotok teljes ortonormált rendszert alkotnak a rendszer Hilbert-terében. (10.7a)-ból látszik, hogy rögzített p impulzus esetén a rendszer legalacsonyabb energiájú állapota a módus $n=0$ állapotához tartozik. Ez koherens állapot, mert D_σ a σ paraméterű koherens állapot keltő operátora (Glauber [100]). A fentiekből az is látható, hogy az eljárás alkalmas a teljes sugárzási tér hosszúhullámú részével történő kölcsönhatás eliminálására, ha a módusok közötti csatolást elhanyagoljuk. Éppen ilyen megfontolás alapján vezettek be hasonló transzformációt Bloch és Nordsieck [73] az infravörös divergencia kiküszöbölésére a kvantum-elektrodinamikában.

A rendszer stacionárius állapotai mellett meghatározhatók a (10.1) időfüggő egyenlet megoldásai, azaz a rendszer dinamikája is. Ehhez térjünk át a szabad módus szerinti kölcsönhatási képre:

$$\psi(t) = \exp \left\{ -i\Omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) t \right\} \varphi(t) \quad (10.8)$$

ahol most $\varphi(t)$ a következő egyenletet elégíti ki:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = K(t) \varphi(t) \quad (10.9)$$

$$K(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e\alpha}{mc} [(\hat{\mathbf{p}}\epsilon) a e^{-i\Omega t} + (\hat{\mathbf{p}}\epsilon^*) a^+ e^{i\Omega t}]$$

ahol

$$H = H_e + H_f + H_I \quad (10.1a)$$

H_e a szabad elektron kinetikus energiája:

$$H_e = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (10.1b)$$

H_f a szabad módus energiája:

$$H_f = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \quad (10.1c)$$

H_I pedig a kölcsönhatási energia:

$$H_I = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \quad (10.1d)$$

a és a^+ abszorpciós és emissziós operátorok, melyek a következő felcserélési törvénynek tesznek eleget

$$aa^+ - a^+a = [a, a^+] = 1. \quad (10.1e)$$

Az egyszerűség kedvéért foglalkozunk cirkulárisan polarizált módussal és alkalmazunk dipólközelítést. Az A vektorpotenciál ekkor

$$\mathbf{A} = \alpha(\varepsilon a + \varepsilon^* a^+), \quad \alpha = c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \quad (10.2)$$

alakban írható. ε komplex polarizációs vektor, melyre

$$\varepsilon\varepsilon^* = 1, \quad \varepsilon\varepsilon = \varepsilon^*\varepsilon^* = 0 \quad (10.2a)$$

V a kvantálási térfogat, ω a szabad módus frekvenciája, az egyéb jelölések pedig megegyeznek az eddigiekkel. Cirkulárisan polarizált esetben az A^2 -es tag H_I -ből H_f -be olvasható be:

$$H_f + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 = \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right), \quad \Omega = \omega \left(1 + \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \right), \quad \omega_p = \frac{4\pi e^2}{mV} \quad (10.3)$$

ω_p formálisan az olyan elektrongáz plazmafrekvenciája, melynek sűrűsége 1 elektron/kvantálási térfogat. A teljes Hamilton-operátor tehát a következő alakot ölti:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} [\hat{\mathbf{p}}\varepsilon a + \hat{\mathbf{p}}\varepsilon^* a^+]. \quad (10.4)$$

A (10.1) Schrödinger-egyenlethez tartozó stacionárius egyenlet

$$H\varphi = E\varphi, \quad \psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi \quad (10.5)$$

ahol most H (10.4) alakú. Vezessük be a következő unitér transzformációt:

$$D = e^{\sigma a^+ - \sigma^+ a} \quad (10.6)$$

melynek a következő eltolási tulajdonságai vannak:

$$D_\sigma^{-1} a D_\sigma = a + \sigma, \quad D_\sigma^{-1} a^+ D_\sigma = a^+ + \sigma^+ \quad (10.6a)$$

(10.9) megoldását

$$\varphi(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau [K(\tau) + f(\tau)] \right\} \varphi(t_0) \quad (10.10)$$

alakban keresve az $f(t)$ c -szám függvényre az

$$f(t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \left[K(t), \int_{t_0}^t K(\tau) d\tau \right] = \hbar \Omega \sigma \sigma^+ \{ \cos [\Omega(t-t_0)] - 1 \} \quad (10.10a)$$

kifejezés adódik. Végül is (10.9) megoldása

$$\varphi(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t-t_0) + \int_{t_0}^t f(\tau) d\tau \right\} D[\sigma(t-t_0)] \varphi(t_0), \quad (10.11)$$

ahol $D[\sigma(t, t_0)]$ a (10.6)-ban bevezetett eltolási operátor

$$\sigma(t, t_0) = \frac{e\alpha}{mc\hbar\Omega} (e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t_0}) p \varepsilon^* \quad (10.11a)$$

paraméterrel. Ha pl. $\varphi(t_0) = |p\rangle |0\rangle$ (szabad elektron vákuumban), akkor $\varphi(t)$ -nek a módot leíró részére koherens állapot adódik ($\sigma(t, t_0)$ paraméterrel), $\psi(t)$ szintén koherens állapotot ír le. Eredményeink tehát megerősítik azt — az infravörös divergencia elméletéből jól ismert — tényt, hogy az elektron sajátterének hosszúhullámú része koherens állapotban van.

Az előzőekben részletesen végigkövetett megoldásmenet lineárisan polarizált módus esetére is átvihető. A Hamilton-operátor ebben az esetben

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} p \varepsilon (a + a^+) + \frac{e^2 \alpha^2}{2mc^2} [a^2 + (a^+)^2] \quad (10.12)$$

Itt ε most valós polarizációs egységvektor.

Vezessük be a

$$C_\theta = e^{\frac{\theta}{2}(a+a^+ - aa)} \quad (10.13)$$

unitér operátort (*Tanabe* [101]), amellyel az a, a^+ operátorok Bogoljubov-típusú transzformációját végezhetjük el. A transzformált Hamilton-operátor

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\nu \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} (p\varepsilon) e^{-\theta} [a + a^+] \quad (10.14)$$

alakban írható,

$$i\hbar 2\Theta = \frac{e^2 \alpha^2}{mc^2 \hbar \Omega} \quad (10.14a)$$

választás esetén és

$$\nu = \Omega sh\Theta = (\omega^2 + \omega_p^2)^{1/2}. \quad (10.14b)$$

A Hamilton-operátor (10.14) alakja már olyan, mint a kiindulási (10.4) Hamilton-operátor cirkulárisan polarizált módus esetén, így rá az előzőekben megismert

módszer alkalmazható. Ennek végigkövetését azonban mellőzzük, mert a továbbiakban nem lesz rá szükségünk.

Használjuk most fel a (10.7) megoldásokat a nemlineáris fékezési sugárzás vizsgálatára. A szórás ismét $V(\mathbf{r})$ háttérpotenciálon történik, a kezdeti és végállapot pedig egyaránt (10.7) típusú hullámfüggvény \mathbf{p}_i és \mathbf{p}_f kezdeti, illetve végső impulzussal. (5.6) és a 6.§-ban kifejtett perturbációs számítás alapján az átmeneti amplitúdó $V(r)$ -ben elsőrendben így írható

$$T_{fi}^{(n)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t} \otimes \langle p_f | V(\mathbf{r}) | p_i \rangle \langle \eta \pm n | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | \eta \rangle. \quad (10.15)$$

Az idő szerinti integrálást elvégezve:

$$T_{fi}^{(n)} = -2\pi i \delta[E(p_f, \eta \pm n) - E(p_i, \eta)] V(\mathbf{Q}) \langle \eta \pm n | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | \eta \rangle \quad (10.15a)$$

ahol

$$V(\mathbf{Q}) = \int d^3r V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}}, \quad \hbar\mathbf{Q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i. \quad (10.15b)$$

A delta-függvény az energiamegmaradást fejezi ki, $E(p, \eta)$ -nak (10.7a)-ban megadott alakját felhasználva:

$$\frac{\mathbf{p}_f^2}{2m} - \hbar\Omega |\sigma_f|^2 = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \hbar\Omega |\sigma_i|^2 \mp n\hbar\Omega \quad (10.15c)$$

(10.15a) ugyanolyan szerkezetű, mint az 5. és 6. fejezetben meghatározott átmeneti amplitúdók. $V(\mathbf{Q})$ és a delta-függvényes rész (a σ_i -t és σ_f -et tartalmazó kicsiny korrekcióktól eltekintve) azonosak az ott kapott eredményekkel, az intenzív módus hatását pedig a J_n Bessel-függvény helyett ezúttal az $\langle \eta^+ n | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | \lambda \rangle$ kifejezés írja le. A felső előjel esetén ez emissziót, az alsó előjel esetén pedig abszorpciót jelent. Felhasználva, hogy $D_{\sigma_1} D_{\sigma_2} = e^{-i\text{Im}(\sigma_1 \sigma_2^*)} D_{\sigma_1 + \sigma_2}$ és figyelembe véve D_{σ} σ szerinti sorfejtésének konkrét alakját, a fenti mátrixelemek az általánosított Laguerrepolinomokkal fejezhetők ki (Abramowitz és Stegun [98]):

$$\langle \eta \pm n | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | \eta \rangle = \pm e^{\pm i n \chi + i \text{Im}(\sigma_f \sigma_i^*)} \otimes \sqrt{\frac{\min(\eta \pm n, \eta)!}{\max(\eta \pm n, \eta)!}} |\tau|^n e^{-\frac{1}{2}|\tau|^2} L_{\min(\eta \pm n, \eta)}^{(n)}(|\tau|^2) \quad (10.16)$$

ahol

$$\sigma_i - \sigma_f = \tau e^{i\chi}. \quad (10.16a)$$

Különösen érdekes az $\eta \gg 1$, $\eta \gg n$ határeset (intenzív módus, a móduskiürülés hatása nem számottevő). Ekkor

$$|\langle \eta \pm n | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | \eta \rangle|^2 \approx J_n^2(2|\tau| \sqrt{\eta}) \quad (10.16b)$$

$2|\tau| \sqrt{\eta}$ a megfelelő klasszikus vektorpotenciál a_0 amplitúdójával a következő kapcsolatban van:

$$2|\tau| \sqrt{\eta} = \frac{ea_0}{m\hbar\Omega} |\varepsilon\mathbf{Q}|. \quad (10.16c)$$

A szórás hatáskeresztmetszetre így adódó kifejezés azonos (5.14)-gyel, vagy (6.12)-vel, ami a szemiklasszikus eredmények értelmezésekor bevezetett intuitív foton-kép alátámasztását jelenti. Általános esetben azonban a (10.16) kifejezés érvényes. Az eddigiekben kifejtett eljárás azt is lehetővé teszi, hogy a fotonrendszer állapotának az elektronnal való kölcsönhatás következtében létrejövő megváltozását vizsgáljuk ([9]), ennek részleteibe itt azonban nem megyünk bele. Csak annyit említünk meg, hogy a fotonszám várható értéke mindig a kezdeti fotonszám + egy pozitív járulék, ami a kölcsönhatás következménye. Ez a járulék éppen az elektron sajátenergiájának az adott módusba jutó része.

10.2. Relativisztikus tárgyalás

A cirkulárisan polarizált kvantált móduossal és k irányú mágneses térrel kölcsönható relativisztikus elektron Dirac-egyenletének megoldását az általunk kidolgozott algebrai módszerrel [10] részletesen végigkövettük az 1.2. §-ban. Az eljárás lényege egy unitér olyan transzformáció bevezetése volt (l. (1.21)), amivel elértük, hogy a bozon-operátorokat tartalmazó részeknek közös mátrixegyütthatója legyen. Így már csak olyan kifejezést kellett diagonalizálni, amellyel a 10.1. §-ban találkoztunk.

Most végigkövetjük a megoldást lineárisan polarizált módus esetén, de mágneses tér nélkül, mivel ez utóbbira nem lesz szükségünk. A megoldás során az 1.2. §-beli kisse eltérő módszert alkalmazunk, amennyiben lényegesen kihasználjuk a rendszer egy szimmetriatulajdonságát, a teljes hármassimpulzus megmaradását. Megmutatjuk azt is, hogy nincs szükség az (1.21) unitér transzformáció „kitalálására” (bár alakja az (1.8) Volkov-állapot ismeretében megsejthető), mert Majorana-reprezentációban a bispinor-amplitúdó alsó és felső komponensei olyan egyenletet elégítenek ki, amelyben a bozon-operátorok együtthatója már skalár és a bozon-rész könnyen diagonalizálható. Végül az így talált állapotokat alkalmazzuk az intenzív kvantált móduson történő Compton-effektus tárgyalására lineárisan és cirkulárisan polarizált esetben. Ezzel az 1.3. fejezet eredményeinek általánosítását és megalapozását nyerjük.

Írjuk az (1.17) Dirac-egyenletet Hamilton-alakban, (10.1)-hez hasonlóan:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (10.17)$$

ahol

$$H = H_e + H_f + H_I \quad (10.17a)$$

H_e a relativisztikus spinor elektron Hamilton-operátora

$$H_e = c\hat{\alpha}\mathbf{p} + \beta mc^2 \quad (10.17b)$$

H_f a szabad módus energiája:

$$H_f = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \quad (10.17c)$$

H_I pedig a kölcsönhatási energia:

$$H_I = -e\mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (10.17d)$$

Lineárisan polarizált módus esetén az A vektorpotenciál:

$$A(\mathbf{r}) = \alpha \varepsilon (a e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad \alpha = c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \quad (10.18)$$

ε a valós polarizációs vektor ($\varepsilon \mathbf{k} = 0$, transzverz módus), a többi jelölés pedig meg-
egyezik részben az előző fejezetével, részben a Dirac-egyenletre eddig alkalmazott
jelölésekkel. A H Hamilton-operátor időfüggetlen és kommutál a $\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$
teljes impulzusoperátorral. Keressük ezért ψ -t a

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi_{E, \mathbf{P}} \quad (10.19)$$

alakban, ahol $\psi_{E, \mathbf{P}}$ H -nak és a teljes impulzusnak szimultán sajátfüggvénye:

$$H\psi_{E, \mathbf{P}} = E\psi_{E, \mathbf{P}}, \quad \left[\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] \psi_{E, \mathbf{P}} = \mathbf{P} \psi_{E, \mathbf{P}}. \quad (10.19a)$$

Alkalmazzuk (10.17)-re az $\exp \left[i \mathbf{k} \mathbf{r} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right]$ unitér transzformációt (ennek hatá-
sára H helyfüggetlen lesz) és fejezzük ki (10.19a) második egyenletéből $\hat{\mathbf{p}} \psi_{E, \mathbf{P}}$ -t.
A transzformált egyenlet:

$$\left\{ c \alpha \left[\mathbf{P} - \hbar \mathbf{k} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] + \beta m c^2 + \hbar \omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \right. \\ \left. - e \alpha \varepsilon c \left(\frac{2\pi \hbar}{\omega V} \right)^{1/2} (a + a^+) \right\} \Phi_{E, \mathbf{P}} = E \Phi_{E, \mathbf{P}} \quad (10.20)$$

ahol

$$\Phi_{E, \mathbf{P}} = \exp \left[i \mathbf{k} \mathbf{r} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] \psi_{E, \mathbf{P}} \quad (10.20a)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\mathbf{K} = \hbar^{-1} \mathbf{P}, \quad K_0 = (\hbar c)^{-1} E, \quad k_0 = \frac{\omega}{c}, \\ \varkappa = \frac{mc}{\hbar}, \quad g = \frac{e}{\hbar} \left(\frac{2\pi \hbar}{\omega V} \right)^{1/2} = \frac{e}{\sqrt{\hbar c}} \left(\frac{\lambda}{V} \right)^{1/2}, \quad \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \quad (10.20b)$$

és jelöljük $\Phi_{E, \mathbf{P}}$ felső és alsó spinorkomponenseit φ -vel, illetve χ -vel, akkor (10.20)
komponensekre bontva így írható:

$$\left\{ \sigma \left[\mathbf{K} - \mathbf{k} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] - \sigma \varepsilon g (a + a^+) \right\} \chi(\mathbf{r}) + \\ + \left\{ \varkappa - K_0 + k_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right\} \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (10.20c)$$

$$\left\{ \sigma \left[\mathbf{K} - \mathbf{k} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] - \sigma \varepsilon g (a + a^+) \right\} \varphi(\mathbf{r}) - \\ - \left\{ \varkappa + K_0 - k_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right\} \chi(\mathbf{r}) = 0 \quad (10.20d)$$

Ez még rendkívül bonyolult egyenletrendszer, mert φ és χ együtthatói bozon-operátorokat tartalmaznak. Ha azonban áttérünk Majorana-reprezentációba és olyan koordináta-rendszert választunk, amelyben a polarizáció az x -, a terjedési irány az y -tengely irányába mutat, akkor lényegesen egyszerűbb szerkezetű egyenlet-rendszert kapunk, hasonlóan ahhoz, ahogyan (7.3) és (7.3a) esetében ez történt. (10.20) Majorana-reprezentációban

$$\left\{ \alpha_x [-K_x + g(a + a^+)] + \beta \left[K_y - k_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] - \right. \\ \left. - \alpha_z K_z + \alpha_y \kappa + k_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right\} \Phi_M = K_0 \Phi_M, \quad (10.21)$$

$$\Phi_M = U_M \Phi_{E,P}, \quad k_y = k_0$$

Φ_M felső és alsó spinorkomponenseit φ_M -mel és χ_M -mel jelölve (10.21) kompo-nensekre bontva így írható:

$$\{ [-K_x + g(a + a^+)] \sigma_x - K_z \sigma_z + \kappa \sigma_y \} \chi_M - (K_0 - K_y) \varphi_M = 0 \quad (10.21a)$$

és

$$\{ [-K_x + g(a + a^+)] \sigma_x - K_z \sigma_z + \kappa \sigma_y \} \varphi_M - \left[K_0 + K_y - 2k_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] \chi_M = 0 \quad (10.21b)$$

(10.21a)-ból φ_M most már egyszerűen kifejezhető. A kapott kifejezést helyettesítsük (10.21b)-be, ekkor χ_M -re a következő egyenletet kapjuk:

$$\left\{ K_x^2 + K_y^2 + K_z^2 + \kappa^2 - K_0^2 - 2g K_x (a + a^+) + \right. \\ \left. + g^2 [a^2 + (a^+)^2] + 2[g^2 + (K_0 - K_y) k_0] \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right\} \chi_M = 0. \quad (10.22)$$

Vegyük észre, hogy (10.22) most már olyan szerkezetű, mint (10.12). Ezért diagoni-zálása is ugyanúgy végezhető el, azaz egy Bogoljubov-transzformáció és egy eltolási transzformáció egymás utáni alkalmazásával és a megoldás

$$\chi_M = C_\theta D_\tau |n\rangle_{\chi_M, 0}(\mathbf{r}) \quad (10.23)$$

ahol

$$\text{th} 2\theta = \frac{g^2}{g^2 + (K_0 - K_y) k_0}; \quad \tau = \tau^* = \frac{g K_x e^{-\theta}}{[g^2 + k_0 (K_0 - K_y)] \text{sh} 2\theta}. \quad (10.23a)$$

A $K[\equiv (K_0, K)]$ négyesimpulzus pedig a következő egyenletet elégíti ki:

$$K^2 = K_0^2 - \mathbf{K}^2 = \kappa^2 + 2(K_0 - K_y) k_0 g_K(n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ g_K(n) \equiv \left[1 + \frac{g^2}{(K_0 - K_y) k_0} \right] \left(n + \frac{1}{2} - \tau^2 \right) \text{sh} 2\theta. \quad (10.23b)$$

Ez K_0 -ra egy nemlineáris egyenlet, csak közelítőleg lehet megoldani. Vezessük ezért be a $Q = K - g_K(n)k$ négyesimpulzust. Könnyen látható, hogy

$$Q^2 = \kappa^2 \quad \text{és} \quad (Q \cdot k) = (K \cdot k). \quad (10.23c)$$

Az utóbbi összefüggés miatt $g_K(n) = g_Q(n)$ és így

$$K = Q + g_Q(n)k. \quad (10.23d)$$

Azaz a teljes négyesimpulzus egy Q szabad tömeghéjon levő impulzus és egy k irányú, intenzitásfüggő nagyságú impulzus összege, a szemiklasszikus elmélethez hasonlóan. (10.19a) második egyenletébe helyettesítve

$$\hat{\mathbf{P}}\chi_{M,0}(r) = \mathbf{P}\chi_{M,0}(\mathbf{r}), \quad \chi_{M,0}(\mathbf{r}) = \chi_{M,0} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{Pr}} \quad (10.24)$$

(10.21a)-ból most $\varphi_{M,0}(\mathbf{r})$ is meghatározható és a teljes bispinor amplitúdó így írható

$$\Phi_{M,0} = \left[1 + (1 + \beta) \alpha_x \frac{g(a + a^+)}{2(Q_0 - Q_y)} \right] u_{Q,M} \quad (10.25)$$

$u_{Q,M}$ a szabad bispinor egyenletet elégíti ki Majorana-reprezentációban. Vissza-transzformálva standard reprezentációra, $\psi_{E,P}$ végső alakja:

$$\begin{aligned} \psi_{E,P} = \psi_Q = e^{-ikr\left(a + a^+ + \frac{1}{2}\right)} \left[1 + g \frac{k\varepsilon}{2(Qk)} (a + a^+) \right] u_Q \otimes \\ \otimes \exp \{i[\mathbf{Q} + \mathbf{k}g_Q(n)]\mathbf{r}\} C_\theta D_\tau |n\rangle. \end{aligned} \quad (10.26)$$

Cirkulárisan polarizált módus esetén a megoldást (1.29) adja meg a $H=0$ helyettesítéssel. A két esetet összefoglalva, a teljes ψ hullámfüggvényt egységesen a következő alakba írhatjuk:

$$\begin{aligned} \psi = e^{ikx\left(a + a^+ + \frac{1}{2}\right)} \left[1 + \frac{\varepsilon k A(0)}{2qk} \right] u_q \otimes \\ \otimes C_\theta D_{\tau,r} |n\rangle \exp \{-i[q + kg_Q(n)] \cdot x\}, \quad Q = q \end{aligned} \quad (10.27)$$

$C_\theta = 1$ ($\theta = 0$) a cirkulárisan polarizált esetben. (10.27) az (1.8) szemiklasszikus Volkov-állapottal nagyfokú analógiát mutat.

A megoldásban szereplő paraméterek (q és n) fizikai jelentését jobban megérthetjük, ha kiszámítjuk az elektron négyesimpulzusának várható értékét, valamint a fotonszám várható értékét. Azt találjuk ([10]), hogy elég széles paramétertartományban q közelítőleg az elektron négyesimpulzusának várható értéke, n pedig a fotonszámé, de mindkét várható érték tartalmaz n -ben és q -ban magasabb rendű korrekciókat, amelyek más tartományban lényegesek lehetnek.

Ezután áttérünk a kvantált sugárzási tér két módusával kölcsönható szabad elektron vizsgálatára. Az egyik módust egzaktul figyelembe vesszük, a másikat perturbációként kezeljük. Más szavakkal nemlineáris Compton-szórással foglalkozunk olyan esetben, amikor az (ε, k) módus fotontartalma tetszés szerinti értékkel változik, az (ε', k') módusban pedig egy új foton jelenik meg.

(7.26), illetve (3.1) analógiájára az emisszió átmeneti amplitúdója:

$$T_{fi} = -ig' \int d^4x \bar{\psi}_f \underline{\varepsilon}' e^{ik'x} \psi_i, \quad g' \equiv (\alpha \lambda' V^{-1})^{1/2}. \quad (10.28)$$

Itt ψ_f és ψ_i (10.27) típusú hullámfüggvény (q', n') , illetve (qn) paraméterekkel. Az előzőekben mondottak alapján (10.28) olyan folyamatot ír le, melynek során $n-n'$ foton szóródik, a szórás folyamán az elektron négyesimpulzusa q -ról q' -re változik, a szórt foton (illetve felharmonikus az $n-n' > 1$) esetben polarizációja ε' , hullámvektora k' . A négyes térre vett integrálás könnyen elvégezhető, eredményül

$$T_{fi} = -ig' (2\pi)^4 \delta^{(4)}(K' + k' - K) t_{fi} \quad (10.29)$$

adódik. A delta-függvény a négyesimpulzus megmaradását fejezi ki, (10.23d) figyelembevételével explicit módon is felírható:

$$q' + g_{q'}(n')k + k' = q + g_q(n)k \quad (10.29a)$$

(10.29a)-ból a szórt sugárzás frekvenciájára másodfokú egyenlet adódik, amelynek megoldása meglehetősen bonyolult alakú. A g csatolási állandóban másodrendű tagot elhagyva azonban:

$$\omega' = \frac{l\omega + \omega_c v^2 \delta}{1 + \left[\frac{l\omega}{\omega_c} + v^2 \right] (1 - \cos \Theta)} \quad (10.30)$$

ahol $\delta = \frac{n-n'}{n}$ a kiürülési tényező, $l = n - n'$ a folyamat rendje, $v^2 = \frac{g^2}{\kappa^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)$

az intenzitásparaméter, Θ a szórási szög, $\omega_c = \frac{mc^2}{\hbar}$ pedig a Compton-frekvencia.

(10.30) nyilvánvalóan (3.3)-nak a móduskiürülést is figyelembe vevő általánosítását jelenti.

A szórásfolyamat átmeneti amplitúdója, $\Phi_p, \underline{\varepsilon}' \Phi_p$ konkrét alakja:

$$t_{fi} = \bar{\Phi}_p \underline{\varepsilon}' \Phi_p = \begin{cases} \bar{u}_{q'r'} M_L u_{qr} \\ \bar{u}_{q'r'} M_C u_{qr} \end{cases} \quad (10.31)$$

ahol

$$M_L = A_0 \underline{\varepsilon}'' + \frac{g}{2q'k} A_1 \underline{\varepsilon}_1 \underline{k} \underline{\varepsilon}'' + \frac{g}{2qk} A_1 \underline{\varepsilon}'' \underline{k} \underline{\varepsilon} \quad (10.31a)$$

vonatkozik a lineárisan polarizált módusra és

$$M_C = B_0 \underline{\varepsilon}'' + \frac{g}{2q'k} (\underline{\varepsilon} B_- + \underline{\varepsilon}^* B_+) \underline{k} \underline{\varepsilon}'' + \frac{g}{2qk} \underline{\varepsilon}'' \underline{k} (\underline{\varepsilon} B_- + \underline{\varepsilon}^* B_+) \quad (10.31b)$$

vonatkozik a cirkulárisan polarizált módusra.

Itt

$$A_i = \langle n' | D_{\tau}^{-1} C_{\theta}^{-1} (a + a^+)^i C_{\theta} D_{\tau} | n \rangle, \quad i = 0, 1 \quad (10.31c)$$

és

$$B_0 = \langle n' | D_{\sigma}^{-1} D_{\sigma} | n \rangle,$$

$$B_{(\pm)} = \left\langle n' \left| D_{\sigma'}^{-1} \begin{pmatrix} a^+ \\ a \end{pmatrix} D_{\sigma} \right| n \right\rangle \quad (10.31d)$$

az átmeneti amplitúdónak a fotonrésztől származó járuléka. $|t_{fi}|^2$ -et a kezdeti spinállapotra átlagolva és a végső spinállapotra összegezve olyan alakot kapunk, amely formailag a szemiklasszikus eredménnyel, (3.4a)-val egyezik meg, csak a $A_0 \rightarrow C_n$, $A_1 \rightarrow \frac{\epsilon a}{2}(C_{n-1} + C_{n+1})$ helyettesítést kell elvégezni. Ha $n' = n_0 - 1$ és $n_0 \gg 1$, $n_0 \gg l$, akkor a kapott kifejezések pontosan reprodukálják a 3. §-ban ismertetett szemiklasszikus eredményeket.

A móduskiürülés hatásának tanulmányozására vizsgáljuk meg a másik határesetet, azaz amikor a módus kiürülése maximális ($\delta = 1$). $\langle |t_{fi}|^2 \rangle_{av}$ -ra ekkor:

$$\langle |t_{fi}|^2 \rangle_{av} = \frac{1}{4} \left(\frac{n\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{n\omega} - 2 + 4|\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'|^2 \right) \otimes \frac{\left(\frac{gn}{\kappa} \right)^{2n}}{n!} |\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon}|^{2(n-1)} e^{-\left(\frac{gn}{\kappa} \right)^2 |\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon}|^2} \quad (10.32)$$

adódik. Ez az n -edrendű folyamatra vonatkozó $\frac{1}{4} \left(\frac{n\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{n\omega} - 2 + 4|\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'|^2 \right)$ Klein—Nishina-képlettől a

$$\frac{(\mu^2 n^2)^n}{n!} e^{-\mu^2 n^2}, \quad \mu = \frac{g}{\kappa} |\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon}| \quad (10.33)$$

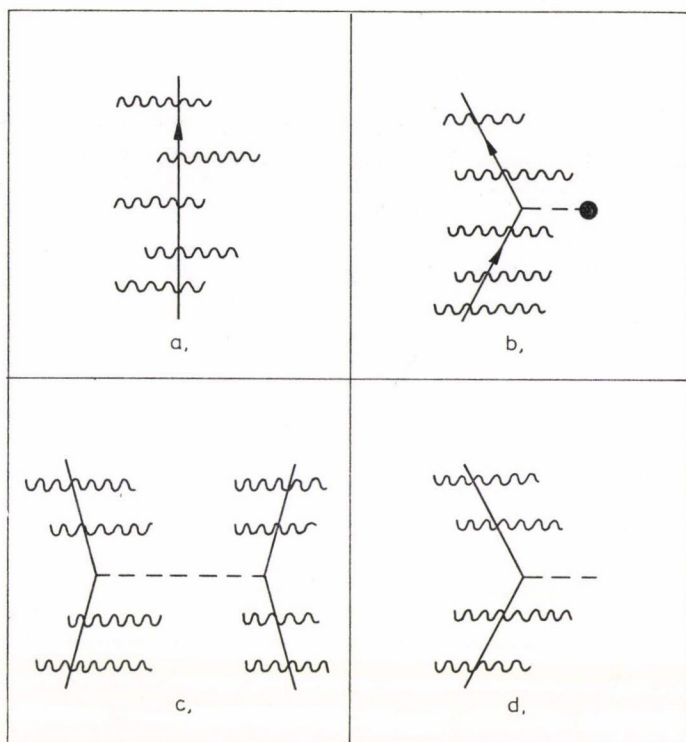
tényezővel különbözik. Ez a tényező explicit módon figyelembe veszi a móduskiürülés hatását, egyúttal a hatáskeresztmetszet formula igen gyors csökkenését is biztosítja az n növelésével.

Az ebben a fejezetben kapott eredmények a szemiklasszikus elmélet során bevezetett intuitív fotonkép megalapozását jelentik. Egyúttal lehetővé teszik a móduskiürülés hatásának explicit figyelembevételét mindazon esetekben, amikor az jelentős. Így egyúttal a szemiklasszikus eredményeknél általánosabb érvényűek, egy teljes kvantum-elektrodinamikai tárgyalásmód felé tett első lépéseknek tekinthetők.

ÖSSZEFOGLALÁS ÉS KITEKINTÉS

Az értekezésben szabad töltött részecskék és nagyintenzitású sugárzási tér (lézerfény) kölcsönhatásakor végbemenő alapvető fizikai folyamatokkal foglalkoztunk. Vizsgáltuk szabad részecske (elektron) állapotait intenzív tér jelenlétében, elektron szórását háttérpotenciálon (indukált fékezési sugárzás és abszorpció), elektron szórását elektronon (Møller-szórás) és fény szórását szabad elektronokon (intenzív Compton-szórás). A vizsgált folyamatokat a 8. ábra szemlélteti.

A vizsgálatok során törekedtünk arra, hogy a fenti folyamatok egységes elméletét dolgozzuk ki. Ezért először az időfüggő szórásszámítás apparátusának segítségével általános módszert adtunk meg az átmeneti amplitúdó meghatározására (5. fejezet). A tárgyalás során végig az így kapott formula jelentette az egyes folyamatok vizsgálatánál a kiindulási alapot, mivel a formula perturbatív és nem-perturbatív esetben egyaránt alkalmazható. Ugyanebben a fejezetben egy „ad-hoc”, nem-perturbatív eljárással, az ún. tér-eltolási transzformációval meghatároztuk



8. ábra. A fény-anyag kölcsönhatás alapfolyamatai intenzív sugárzási tér jelenlétében. Az ábrákon a sok hullámvonal az intenzív (lézer) módot reprezentálja, az egyéb kölcsönhatásokat szaggatott vonal jelzi. Folytonos vonal az elektron terjedését ábrázolja. (Az ábra csak szemléltetés, nem felel meg közvetlenül Feynman-diagramoknak.) a) Szabad terjedés intenzív térben, b) Szórás háttérpotenciálon (indukált fékező sugárzás és abszorpció), c) Elektron-elektron szórás, d) Intenzív Compton-szórás

a fékező sugárzás hatáskeresztmetszetét. A 6. fejezetben pedig olyan perturbációszámítást ismertettünk, amely nagy intenzitások esetén szisztematikus módszert ad a szórási amplitúdó meghatározására tetszőleges pontossággal. A módszer hatékonyságát jelzi, hogy a mondott perturbációszámítás első rendjében már megkapjuk az n -fotonos átmenetek amplitúdóját, a szokásos perturbációszámításnál jobb közelítésben. Ezt ismét az indukált fékező sugárzás és abszorpció vizsgálatával demonstráltuk. A 7. fejezetben megadtuk ezen intenzív térbeli perturbációszámítás relativisztikus általánosítását, amelyhez a Volkov-állapotok néhány újonnan felismert tulajdonságát (háromdimenziós teljesség a null-hipersíkon) használtuk ki. Ennek segítségével elsőként közöltünk explicit hatáskeresztmetszet kifejezést relativisztikus elektronok indukált fékező sugárzására és abszorpciójára. A 8. fejezetben külső térbeli nemrelativisztikus szabad elektronok Schrödinger-egyenletének a dipólközelítésen túlmenő megoldásával foglalkoztunk. A pontos megoldás optikailag indukált sáv-

szerkezetre vezet. Ennek fellépése azonban olyan intenzitástartományban várható, amelyben az elektron mozgása már szükségképpen relativisztikus, így kívül esik a Schrödinger-egyenlet alkalmazhatósági körén. A dipólközelítésen túlmenő közelítő hullámfüggvényt — amely tehát a nemrelativisztikus elméletben teljesen pontosnak tekinthető — a 9. fejezetben, a külső tér jelenlétében végbemenő elektron-elektron szórásra alkalmaztuk. Az átmeneti amplitúdóra kétféle, egymással ekvivalens kifejezést nyertünk. Az egyik alak a szórásban fellépő rezonanciák vizsgálatára különösen alkalmas. A másik pedig lehetővé teszi, hogy a szórásfolyamatot úgy interpretáljuk, mint az elektronok között ható effektív potenciál által létrehozott szórást. Az effektív potenciál elegendően nagy intenzitás esetén vonzóvá válhat, ami további érdekes effektusokat okozhat.

Végül a 10. fejezetben megvizsgáltuk a külső tér közelítésnél finomabb közelítést jelentő kvantált sugárzási módussal történő kölcsönhatást. Egzakta megoldást adtunk mind a Schrödinger-, mind a Dirac-egyenletre. Az egzakt megoldást pedig alkalmaztuk nemrelativisztikus esetben a fékezési sugárzás, relativisztikus esetben pedig a Compton-szórás vizsgálatára. Eredményeink határesetként tartalmazták a szemiklasszikus eredményeket — a határátmenet egyben megadta a szemiklasszikus elmélet érvényességi korlátait is —, azon túlmenően pedig lehetővé tették a móduskiürülés hatásának explicit figyelembevételét is.

Az értekezésben vizsgált problémakörök — kapcsolódva a mind nagyobb intenzitású lézerek megjelenéséhez — továbbra is az érdeklődés homlokterében állnak. Vonatkozik ez elsősorban az indukált fékezési sugárzásra és abszorpcióra. A fúziós energiatermeléshez szükséges igen forró plazma előállítása lézeres fűtéssel az elmélet közvetett igazolásának tekinthető, ennek mikroszkopikus mechanizmusa ugyanis az inverz fékezési sugárzás (abszorpció). Az idevonatkozó kísérletek eredményeit ma már összefoglaló cikkek és tankönyvek is tartalmazzák (l. pl. [102]). A közvetett eredmények mellett két kísérlet ([67], [68]) közvetlenül az effektus kimutatására irányult. Ezeket a 2.§-ban tekintettük át, eredményeik — mint láttuk — jó összhangban vannak az elméleti várakozással. Részben ezek a kísérletek stimulálják az elmélet újabb fellendülését ([103], [104]). Lényegesen problematikusabb az intenzív Compton-szórással kapcsolatos helyzet. Az első ide irányuló kísérletek plazma transzmisszióját mérték ([105], [106]), igen nehéz azonban ekkor az indukált szórást a közönséges Compton-effektustól megkülönböztetni. Ezen kezdeti kísérletek nehézsége pedig, úgy látszik, hosszú időre elriasztotta a kutatókat a további kísérleti vizsgálatoktól. Csak legújabban fordult az érdeklődés ismét ezen folyamat felé, ugyanis fúziós kísérletekhez előállított lézerplazmában CO_2 lézer (???) nagyon magas rendű felharmonikusainak ($n \cong 30$ -ig) keltését figyelték meg [107]. Ennek mikroszkopikus mechanizmusa valószínűleg a nemlineáris Compton-szórás volt. Az elektron-elektron szórásra vonatkozó eddigi eredmények pedig még nem voltak elégségesek arra, hogy nyomukban részletes kísérleti vizsgálatok induljanak meg. Remény van azonban arra, hogy az általunk nyert viszonylag egyszerű szerkezetű eredmények és főleg az elektronok közötti vonzó kölcsönhatás lehetősége erre a feladatra irányítja a kísérleti fizikusok érdeklődését.

Befejezésül még a következőket jegyezzük meg. Az értekezés során végig következetesen egy egységes tárgyalásmódot igyekeztünk követni. Az emögött levő elméleti eszköz lényegében véve a külső térre vonatkozó Furry-kép bevezetése volt. Az értekezés utolsó fejezetében — a konkrét folyamatok tárgyalása mellett — többek között azt is megmutattuk, hogy ha a kvantált sugárzási tér egy módusa igen intenzív és

a folyamat során bekövetkező fotonszámváltozás, valamint az egyéb sugárzási korrekciók elhanyagolhatók, akkor az adott módust állandó amplitúdójú (klasszikus) térként, azaz külső tér közelítésben vehetjük figyelembe. A teljes $A_\mu(x)$ vektorpotenciál ekkor két részre bontható:

$$A_\mu(x) = \hat{A}_\mu(x) + A_\mu^{\text{ext}}(x) \quad (1)$$

ahol \hat{A}_μ a kvantált, \hat{A}_μ^{ext} pedig a külső sugárzási tér vektorpotenciálja. A kölcsönhatási Hamilton-operátor szokásos alakja a kvantum-elektrodinamikában:

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{c} \int j^\mu(x) [\hat{A}_\mu(x) + A_\mu^{\text{ext}}(x)] d^3r \quad (2)$$

Furry-képbe az

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{c} \int j^\mu(x) A_\mu^{\text{ext}}(x) d^3r \right\} K \quad (3)$$

egyenletet kielégítő K unitér transzformációval térhetünk át ([43] 14. fejezet és [108]). Az állapotok Furry-képben az

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \right\rangle = \left\{ \frac{1}{c} \int j_F^\mu(x) \hat{A}_\mu(x) d^3r \right\} \left| \right\rangle \quad (4)$$

Schrödinger-egyenletnek tesznek eleget, ahol

$$j_F^\mu = K^{-1} j^\mu K = e \bar{\psi}_F \gamma^\mu \psi_F. \quad (4a)$$

A ψ_F operátor és a ψ szabad téroperátor kapcsolata: $\psi_F = K^{-1} \psi K$ és ψ_F kielégíti az (1.2) külső térbeli Dirac-egyenletet:

$$[\underline{H} - \kappa] \psi_F = 0, \quad \underline{H} = i\partial - e \underline{A}^{\text{ext}} \quad (5)$$

ψ_F -et a szabad ψ operátornál használt síkhullám-kifejtés helyett most Volkov-állapotok szerint fejtjük ki:

$$\psi_F(x) = \sum_r \int d^3p [a_r(p) \psi_{pr}^{(+)}(x) + b_r(p) \psi_{pr}^{(-)}(x)] = \psi_F^{(+)} + \psi_F^{(-)} \quad (6)$$

ahol a és b fermion-operátorok:

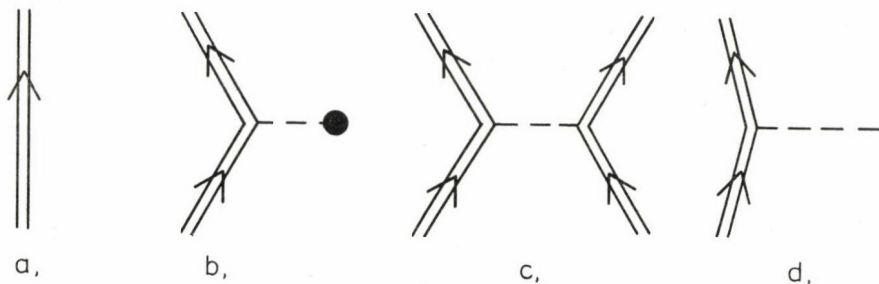
$$\{a_r(p), a_{r'}^+(p')\} = \{b_r(p), b_{r'}^+(p')\} = \delta_{rr'} \delta^{(3)}(p-p'), \text{ stb.} \quad (6a)$$

A téroperátorok pozitív frekvenciás részére vonatkozó kommutációs szabály

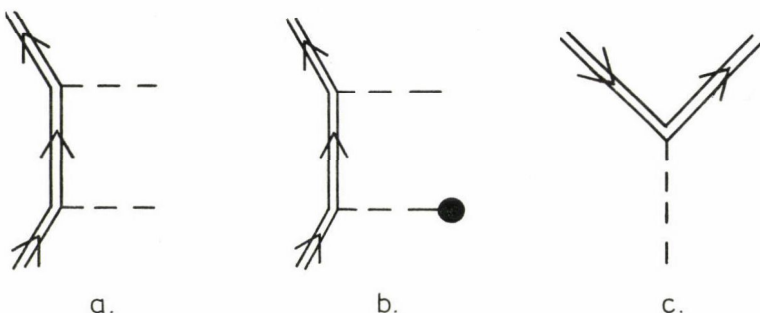
$$\{\psi_F^{(+)}(x), \bar{\psi}_F^{(+)}(x')\} = iG^{(+)}(x, x') \quad (7)$$

ahol $G^{(+)}(x, x')$ az 1.3- §-ban megismert retardált Green-függvény (l. (1.33)).

A Furry-képbe a folyamatok Feynman—Dyson-féle grafikus ábrázolása is átvihető. A szabad elektronvonalakat tartalmazó Feynman-diagrammokról való megkülönböztetés céljából a külső térbeli elektronokat párhuzamos vonalpárral reprezentáljuk. Külső elektronvonalaknak az (1.8) Volkov-állapotok, belső elektronvonalaknak pedig az (1.33), (illetve a fenti (7)) retardált Green-függvények felelnek meg, a gráfszabályok egyébként megegyeznek a Feynman-féle szabályokkal. Az ál-



9. ábra. Az intenzív térbeli fény-anyag kölcsönhatás alapfolyamatainak megfelelő Feynman-diagramok Furry-képben. A folyamatok megegyeznek a 8. ábrán feltüntetett folyamatokkal



10. ábra. Bonyolultabb folyamatok Feynman-diagramjai Furry-képben.
a) Kettős Compton-szórás. b) Spontán fékezési sugárzás. c) Párkeltés (csak külső vonalat tartalmaz, de az egyik pozitron vonal)

talunk vizsgált és a 8. ábrán szemléletesen ábrázolt folyamatoknak most tehát Feynman-diagramok felelnek meg, melyeket a 9. ábrán tüntettünk fel.

A 9. ábráról leolvashatjuk, hogy valóban a legegyszerűbb folyamatokat vizsgáltuk az eddigiekben, mert valamennyi diagramon a Volkov-állapot csak külső vonalként szerepel. Az értekezésben kifejtett elmélet természetes továbbfejlesztését jelenti olyan folyamatok vizsgálata, amelyekben a Volkov-állapot belső vonalként is megjelenik. Néhány ilyen folyamatot mutat a 10. ábra.

A 10. ábrán feltüntetett folyamatok közül mind elméleti, mind gyakorlati szempontból a 10.a: kettős Compton-szórás tarthat számot a legnagyobb érdeklődésre. Mind a Kapitza—Dirac-effektus, mind pedig a szabad elektron-lézer erre az alapfolyamatra vezethető ugyanis vissza. Mindez azonban már túlmutat a jelen értekezés keretein és jövőbeni vizsgálatok számára jelent feladatot.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton mondok köszönetet dr. Siklós Tivadarnak és dr. Zawadowski Alfrédnek, a Szilárdtest-elméleti Osztályon megteremtett alkotó légkörért, amely lehetővé tette az értekezés témakörében az elmélyült kutatómunkát, valamint a munka és az értekezés elkészítésének minden fázisában tanúsított konstruktív érdeklődésüket és hasznos tanácsaikat.

Dr. Kroó Norbertnek, aki a munka iránt folyamatosan nagy érdeklődést tanúsított, akinek elismerése és támogatása számomra igen fontos volt.

Dr. Farkas Győzőnek, akinek nagy nemzetközi elismerést kiváltó kísérletei keltették fel érdeklődésemet az intenzív térbeli folyamatok iránt. A vele folytatott diskusziók nagymértékben inspirálták munkámat, számos elméleti eredményt pedig kísérletei alapján megjósolt (pl. az elektronok közötti vonzó kölcsönhatás lehetőségét).

Varró Sándornak, aki a közös munka során tanítványból barátta és kollégává vált és akinek fiatalos lendülete és elfogulatlansága mindkettőnk számára nagyon hasznosnak bizonyult.

Ezúton köszönöm meg *Gazdag Ferencnek* a jelen és sok más kézirat gondos gépelését és ennek során tanúsított türelmét.

1. FÜGGELÉK

RELATIVISZTIKUS JELÖLÉSEK

A kontravariáns x^μ négyesvektorral jelöljük a $(ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{x})$ téridő koordinátákat. Tehát:

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \mathbf{x}). \quad (\text{F1.1})$$

A kovariáns x_μ négyesvektort úgy kapjuk, hogy x^μ térszerű komponenseinek előjelét megváltoztatjuk:

$$x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -\mathbf{x}). \quad (\text{F1.2})$$

Ez definiálja a $g_{\mu\nu}$ metrikus tenzort

$$\left. \begin{aligned} x_\mu &= g_{\mu\nu} x^\nu \\ g_{\mu\nu} &= 0, \quad \text{ha} \quad \mu \neq \nu \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3) \\ 1 &= g_{00} = -g_{ii} \quad (i = 1, 2, 3) \end{aligned} \right\} \quad (\text{F1.3})$$

Szorzat kifejezésekben az azonos indexekre összegzés értendő. Az $a = \{a^\mu\}$ és $b = \{b^\mu\}$ négyesvektorok skalárszorzata:

$$a \cdot b = a^\mu b_\mu = g_{\mu\nu} \cdot a^\mu b^\nu = a_0 b_0 - ab. \quad (\text{F1.4})$$

A négyes gradiens definíciója:

$$\partial = \{\partial^\mu\}, \quad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \quad (\text{F1.5})$$

A Dirac-mátrixok a következő antikommutációs törvénynek tesznek eleget:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3). \quad (\text{F1.6})$$

A gyakran előforduló α és β mátrixokkal a következő kapcsolatban állnak:

$$\gamma = \beta \alpha \quad \gamma_0 = \beta. \quad (\text{F1.7})$$

Standard reprezentációban:

$$\gamma_0 = \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{F1.7a})$$

ahol

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{F1.7b})$$

a szokásos 2×2 -es Pauli-mátrixok és

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{F1.7c})$$

a 2×2 -es egységmátrix.

A $\{\gamma^\mu\}$ mátrixkomponensű négyesvektor és egy tetszőleges $a = \{a^\mu\}$ közönséges négyesvektor skalárszorzata gyakran előforduló mennyiség, erre a Feynman-féle „dárda” jelölést alkalmazzuk:

$$a \cdot \gamma = a^\mu \gamma_\mu = \underline{a}. \quad (\text{F1.8})$$

A töltés és a tömeg a következő kombinációkban fordulnak elő:

$$\epsilon = \frac{e}{\hbar c}, \quad \kappa = \frac{mc}{\hbar}. \quad (\text{F1.9})$$

Az elektron kinetikai négyesimpulzusára pedig

$$\Pi_\mu = i\partial_\mu - \epsilon A_\mu^{\text{ext}}. \quad (\text{F1.10})$$

2. FÜGGELÉK

FÉNYSZERŰ FORMALIZMUS

Tegyük fel, hogy az \mathbf{n}, \mathbf{e}_i ($i=1, 2$) vektorok teljes ortonormált rendszert alkotnak a hármas térben. Ekkor az

$$n^\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, \mathbf{n}), \quad \hat{n}^\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -\mathbf{n}), \quad e_i^\mu = (0, \mathbf{e}) \quad (\text{F2.1})$$

négyesvektorok ortonormális bázist alkotnak a négyestérben. A szokásosan használt bázissal ellentétben n és \hat{n} fényszerű bázisvektorok ($n^2 = \hat{n}^2 = 0$, de $n\hat{n} = 1$). Célszerű a síkhullám alakú külső tér problémákban az $n^\mu = \frac{c}{\sqrt{2}\omega} k^\mu$ választás, ahol k^μ a síkhullám hullámszám négyesvektora.

Tetszőleges $a = \{a^\mu\}$ négyesvektor kifejezhető a fenti bázisvektorok szerint:

$$a = na_u + \hat{n}a_v - e_i a_i \quad (i = 1, 2\text{-re összegezés}). \quad (\text{F2.2})$$

Itt

$$a_u = \hat{n}a, \quad a_v = na, \quad a_i = -(e_i a). \quad (\text{F2.a})$$

Speciálisan a koordinátavektor esetén:

$$x_u = v, \quad x_v = u. \quad (\text{F2.3})$$

Az a^μ és b^μ négyesvektorok skalárszorzata:

$$a \cdot b = a_u b_v + a_v b_u - a_i b_i \quad (\text{F2.4})$$

$\{\gamma^\mu\}$ fényszerű komponenseire fennáll, hogy

$$\gamma_u^2 = \gamma_v^2 = 0, \quad \{\gamma_u, \gamma_i\} = \{\gamma_v, \gamma_i\} = 0 \quad (i = 1, 2) \quad (\text{F2.5})$$

$$\{\gamma_u, \gamma_v\} = 2.$$

Itt $\{ \}$ antikommutátort jelöl.

Definiáljuk a \mathbf{P}_u és \mathbf{P}_v projekciós operátorokat az (u, v) szubalgebrán:

$$\mathbf{P}_u = \frac{1}{2} \gamma_v \gamma_u, \quad \mathbf{P}_v = \frac{1}{2} \gamma_u \gamma_v, \quad \mathbf{P}_u + \mathbf{P}_v = 1. \quad (\text{F2.6})$$

Hasonlóan vezessük be a w tetszőleges bispinor u és v komponenseit a következő definícióval:

$$w_u = \gamma_u w, \quad w_v = \gamma_v w. \quad (\text{F2.7})$$

Kihasználva az (F2.5) tulajdonságokat megmutatható, hogy

$$\mathbf{P}_u w_u = \mathbf{P}_v w_v = 0, \quad \mathbf{P}_u w_v = w_v, \quad \mathbf{P}_v w_u = w_u. \quad (\text{F2.8})$$

Az (F2.8) összefüggések külső tér problémákban a w bispinor-amplitúdó négy komponensére fennálló, általában négy csatolt egyenletről álló egyenletrendszer szétcsatolását teszik lehetővé.

IRODALOM

1. *J. Bergou*, Acta Phys. Hung. 39, 185, 1975.
2. *J. Bergou*, Acta Phys. Hung. 40, 55, 1976.
3. *J. Bergou*, J. Phys. A: Math. Gen. 13, 2817, 1980.
4. *J. Bergou* and *S. Varró*, J. Phys. A: Math. Gen. 13, 2823, 1980.
5. *J. Bergou* and *S. Varró*, J. Phys. A: Math. Gen. 13, 3553, 1980.
6. *J. Bergou*, in Proceedings of Symposium on „Laser Physics” (Budapest, 15–16 May 1979, published 1980) p. 49.
7. *J. Bergou*, *S. Varró* and *M. V. Fedorov*, J. Phys. A: Math. Gen. 14, 2305, 1981).
8. *Ja. Bergou*, *S. Varró* i *M. V. Fedorov*, megjelenés alatt a ZhETF-ben (1981).
9. *J. Bergou* and *S. Varró*, J. Phys. A: Math. Gen. 14, 1469, 1981.
10. *J. Bergou* and *S. Varró*, J. Phys. A: Math. Gen. 14, 2281, 1981.
11. *J. H. Eberly*, in Progress in Optics vol. VII. (North-Holland, 1969) p. 361.
12. *H. Mitter*, Acta Phys. Austr. Suppl. XIV, 397, 1975.
13. *D. M. Volkov*, Z. Physik 94, 250, 1935.
14. *L. S. Brown* and *T. W. B. Kibble*, Phys. Rev. 133, A705, 1964.
15. *J. D. Bjorken* and *S. D. Drell*, Relativistic Quantum Mechanics. McGraw-Hill, N. Y., 1964.
16. *R. A. Neville* and *F. Rohrlich*, Nuovo Cim. 14, 625, 1971.
17. *R. A. Neville* and *F. Rohrlich*, Phys. Rev. D3, 1692, 1971.
18. *W. Becker* and *H. Mitter*, J. Phys. A: Math., Nucl. Gen. 7, 1266, 1974.
19. *V. I. Ritus*, Ann. Phys. (N. Y.) 69, 555, 1972.
20. *J. H. Eberly*, Proc. Int. Conf. on Optical Pumping and Atomic Line Shape (OPALS) p. 311. Warsaw, 1968.
21. *Ja. B. Zel'dovich*, ZhETF 51, 1492, 1966.
22. *L. V. Keldysh*, ZhETF 47, 1945, 1964.
23. *R. H. Kohler*, Phys. Rev. 151, 165, 1966.
24. *H. H. Nickle*, J. Math. Phys. 7, 1497, 1966.
25. *F. Ehlotzky*, Opt. Comm. 27, 65, 1978.
26. *W. Becker*, J. Phys. A: Math. Gen. 8, 160, 1975.
27. *P. J. Redmond*, J. Math. Phys. 6, 1163, 1965.
28. *V. P. Oleinik*, a) Ukr. Fiz. Zh. 13, 1205, 1968, ibid 14, 2076, 1969; b) ZhETF 61, 27, 1971.
29. *B. Beers* and *H. H. Nickle*, J. Math. Phys. 13, 1592, 1972.
30. *P. L. Kapitza* and *P. A. M. Dirac*, Proc. Camb. Philos. Soc. 29, 297, 1933.
31. *N. D. Sen Gupta*, Z. Phys. 200, 13, 1967.
32. *I. Berson* and *J. Valdmantis*, J. Math. Phys. 14, 1481, 1973.
33. *M. V. Fedorov*, a) ZhETF 52, 1434, 1967; b) ZhETF 68, 1209, 1975.
34. *W. Becker*, *R. Meckbach* and *H. Mitter*, J. Phys. A: Math. Gen. 12, 799, 1979.
35. *W. Becker* and *H. Mitter*, J. Phys. A: Math. Gen. 12, 2407, 1979.
36. *C. Cronström* and *M. Noga*, Phys. Letters 60A, 137, 1977.
37. *W. Becker*, Physica 87A, 601, 1977.
38. *I. Berson*, ZhETF 56, 1627, 1969.
39. *I. Berson*, Izv. AN Latv. SSR No3, 3, 1970.
40. *I. Berson*, Izv. AN Latv. SSR No5, 3, 1969.
41. *D. I. Abakarov*, *V. P. Oleinik*, Teor. Mat. Fiz. 12, 78, 1972.
42. *M. V. Fedorov* and *A. E. Kazakov*, Z. Phys. 261, 191, 1973.
43. *J. M. Jauch* and *F. Rohrlich*, The Theory of Photons and Electrons. Addison-Wesley, Cambridge, Mass., 1955.
44. *V. J. Ritus*, *A. I. Nikishov*, Kvantovaja elektrodinamika, Trudü Fiz. Inszt. im Lebegyeva, t. 111, Nauka, Moszkva, 1979.
45. *J. H. Eberly* and *H. R. Reiss*, Phys. Rev. 145, 1035, 1966.
46. *H. R. Reiss* and *J. H. Eberly*, Phys. Rev. 151, 1058, 1966.
47. *N. D. Sen Gupta*, Bull. Math. Soc. (Calcutta) 41, 187, 1949.
48. *Vachaspati*, Phys. Rev. 128, 664, 1962; ibid. 130, 2598, 1963.
49. *L. D. Landau*—*E. M. Lifšic*, Elméleti fizika II: Klasszikus erőterek. Tankönyvkiadó, Bp. 1976.
50. *F. Rohrlich*, Classical Charged Particles. Addison-Wesley, Reading, 1965.
51. *Ja. B. Zel'dovich*, Usp. Fiz. Nauk 110, 139, 1973.
52. *F. V. Bunkin*, *M. V. Fedorov*, ZhETF 49, 1215, 1965.
53. *M. M. Denisov*, *M. V. Fedorov*, ZhETF 53, 1342, 1967.
54. *H. Brehme*, Phys. Rev. C3, 837, 1971.

55. N. M. Kroll and K. M. Watson, *Phys. Rev. A* **8**, 804, 1973.
56. R. K. Osborn, *Phys. Rev. A* **5**, 1660, 1972.
57. H. Brysk, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8**, 1260, 1975.
58. F. Ehlotzky, University of Innsbruck Preprint, 1980.
59. F. V. Bunkin, R. V. Karapetyan, *Zh. Radiofiz. i Kvant. Elektroniki* **14**, 748, 1971.
60. H. Krüger and Ch. Jung, *Phys. Rev. A* **17**, 1706, 1978.
61. Ch. Jung, *Phys. Rev. A* **21**, 408, 1980.
62. P. Zoller, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **13**, L249, 1980.
63. R. V. Karapetyan, M. V. Fedorov, *ZhETF* **75**, 816, 1978.
64. V. P. Silin, *ZhETF* **47**, 2254, 1964.
65. G. J. Pert, *J. Phys. A: Gen. Phys.* **5**, 506, 1972; *ibid* **9**, 463, 1976.
66. F. V. Bunkin, A. E. Kazakov, M. V. Fedorov, *Usp. Fiz. Nauk* **107**, 559, 1972.
67. a) A. Weingartshofer, J. K. Holmes, G. Caudle, E. M. Clarke and H. Krüger, *Phys. Rev. Letters* **39**, 269, 1977. b) A. Weingartshofer, E. M. Clarke, J. K. Holmes and Ch. Jung, *Phys. Rev. A* **19**, 2371, 1979.
68. a) Gy. Farkas, in *Multiphoton Processes*, Proceedings of ICOMP. Rochester, 6—9 June 1977; published Wiley, N. Y. 1978. p. 81; b) L. A. Lompré, G. Mainfray, C. Manus and Gy. Farkas, *Phys. Rev. Letters* **43**, 1243, 1979.
69. M. Al'perin, *ZhETF* **14**, 3, 1944.
70. N. D. Sen Gupta, *Bull. Math. Soc. (Calcutta)* **44**, 175, 1952.
71. P. Stehle, *J. Opt. Soc. Am.* **53**, 1003, 1963.
72. Z. Fried, *Phys. Letters* **3**, 349, 1963.
73. F. Bloch and A. Nordsieck, *Phys. Rev.* **52**, 54, 1937.
74. I. I. Goldman, *Phys. Letters* **8**, 103, 1964.
75. A. I. Nikishov, V. I. Ritus, *ZhETF* **46**, 776, 1964; *ibid.* **47**, 1130, 1964.
76. N. B. Narozhny, A. I. Nikishov, V. I. Ritus, *ZhETF* **47**, 931, 1964.
77. Z. Fried and J. H. Eberly, *Phys. Rev.* **136**, B871, 1964.
78. P. G. De Baryshe, Thesis, Univ. of Pittsburgh. 1965.
79. F. Ehlotzky, *Z. Phys.* **203**, 119, 1967.
80. L. M. Frantz, *Phys. Rev.* **139**, B1326, 1965.
81. T. W. B. Kibble, *Phys. Rev.* **138**, B740, 1965.
82. Z. Fried, A. Baker and D. Korff, *Phys. Rev.* **151**, 1040, 1966.
83. O. Von Roos, *Phys. Rev.* **150**, 1112, 1966.
84. J. F. Dawson and Z. Fried, *Phys. Rev. D* **1**, 3363, 1970.
85. V. P. Oleinik and V. A. Sinyak, *Opt. Comm.* **14**, 179, 1979.
86. W. Becker, V. Koch and H. Mitter, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8**, 1480, 1975.
87. F. Körmendi, a) *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10**, 1633 (1977); b) Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy Preprint Beograd, 1980.
88. M. V. Fedorov, J. K. McIver, P. N. Lebedev Institute Preprint. No 129, 1979.
89. F. Ehlotzky and C. Leubner, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8**, 1806, 1975.
90. V. P. Oleinik, *ZhETF* **52**, 1049, 1967, *ibid* **53**, 1997, 1967.
91. J. Bös, W. Brock, H. Mitter and Th. Schott, *J. Phys. A: Math. Gen.* **12**, 715, 1979.
92. J. Bös, W. Brock, H. Mitter and Th. Schott, *J. Phys. A: Math. Gen.* **12**, 2573, 1979.
93. A. I. Baz, Ja. B. Zel'dovich, A. M. Perelomov, *Rasszejanyija, reakcii i raspadü*, Nauka, Moszkva, 1971.
94. W. C. Henneberger, *Phys. Rev. Letters* **21**, 838, 1968.
95. L. D. Landau—E. M. Lifsic, *Elméleti fizika III: Kvantummechanika*. Tankönyvkiadó, Bp. 1978.
96. E. Majorana, *Nuovo Cim.* **14**, 171, 1937.
97. F. M. Arscott, *Periodic differential equations* Oxford: Pergamon Press, 1964.
98. M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*. London: Dover, 1964.
99. I. S. Gradshteyn, J. S. Ryzhik, *Tablicü integralov, szum i proizvedenij*. Nauka, Moszkva, 1971.
100. R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **130**, 2529, 1963, *ibid.* **131**, 2766, 1963.
101. K. Tanabe, *J. Math. Phys.* **14**, 618, 1973.
102. H. Dreicer, in *Proc. of Third Symposium on Plasma Heating in Toroidal Devices*, Varenna Sept 6—17 1976. Editrice Compositori, Bologna 1976. p. 333.
103. L. Schlesinger and J. Wright, *Phys. Rev. A* **20**, 1934, 1979, *ibid* **22**, 909, 1980.
104. G. Ferrante, *Phys. Rev. A* **22**, 2529 1980.
105. M. Decroisette, a) *Phys. Letters A* **32**, 249, b) *Phys. Rev. A* **5**, 1391, 1972.
106. I. K. Krasnyuk, P. P. Pashinin, *Pisma v ZhETF* **12**, 439, 1970.
107. R. L. Casman et al., *Phys. Rev. Letts.* **46**, 29 1981.
108. W. H. Furry, *Phys. Rev.* **81**, 115, 1951.

REND-RENDEZETLENSÉG, ALAGÚTAZÁS ÉS FONONOK A FERROELEKTROMOS FÁZISÁTALAKULÁSOK DINAMIKAI MODELLJÉBEN

SIKLÓS TIVADAR

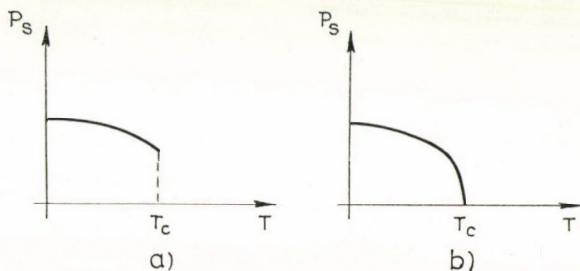
MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Budapest

Csatolt anharmonikus oszcillátorok rendszerének általános alakú Hamilton operatorából kiindulva a variációs elv felhasználásával egy olyan effektív pseudospin-fonon Hamilton operatort vezetünk be, amely egyaránt leírja az atomok statisztikus rendeződési folyamatát, alagútaozását az egyensúlyi állapotok között és fonon típusú rezgéseit. Megmutatjuk, hogy a vizsgált modellben lezajló (első-, illetve másodrendű) struktúrális fázisátalakulás az atomok redukált kötési energiájától és a null-ponti rezgések energiájától függően lehet rend-rendezetlen típusú, rácstorzulással járó, vagy kevert típusú.

1. BEVEZETÉS

Ferroelektromos anyagoknak azokat az anyagokat nevezzük, amelyekben egy meghatározott T_c hőmérsékleten első-, vagy másodrendű fázisátalakulás zajlik le és egy P_s spontán polarizációval rendelkező fázis lép fel. A ferroelektromos anyagok spontán polarizációjának hőmérsékletfüggését az 1. ábrán szemléltetjük. A fázisátalakulási hőmérséklet környezetében a ferroelektromos anyagok dielektromos tulajdonságai anomálisak, például a dielektromos szuszceptibilitás $\epsilon(T)$ hirtelen megnövekszik a fázisátalakulás hőmérséklete előtt, majd a fázisátalakulás lezajlása után újra lecsökken, ezt a jelenséget mutatjuk be a 2. ábrán egy jellegzetesen ferroelektromos anyag, a báriumtitanát (BaTiO_3) esetében.

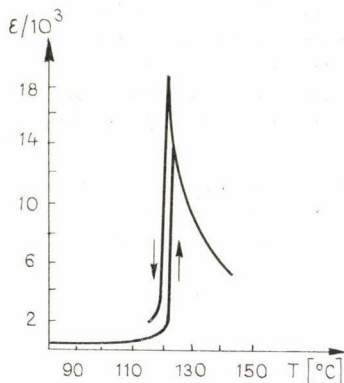
A struktúrális fázisátalakulások (amelyek sorába tartoznak a ferroelektromos fázisátalakulások is) dinamikájának leírását általában a kritikus rezgésmódus fogalmának a bevezetésével fogalmazzák meg. Kritikus rezgésmódusnak azt a rezgés-



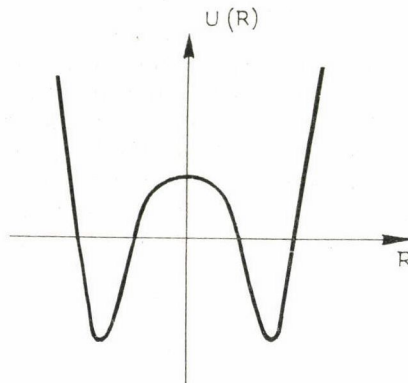
1. ábra. A spontán polarizáció hőmérsékletfüggése első- (a) és másodrendű (b) fázisátalakulás esetében

módust nevezzük, amelyik meghatározza az adott fázisátalakulás létrejöttében lényeges szerepet játszó aktív atomcsoportok mozgását. A strukturális fázisátalakulásokat a kritikus rezgésmódus jellege szerint szokás csoportosítani és így azok két osztályba sorolhatók: a rend-rendezetlen típusú (order-disorder) és a rácsstorzulással járó (displacive) fázisátalakulások osztályába [2], [3]. A rácsstorzulással járó fázisátalakulást a kristályrácshoz a kritikus rezgési módus: a lágy fononok által létrehozott dinamikai instabilitása okozza, míg a rend-rendezetlen típusú fázisátalakulás az aktív atomcsoportok rendeződési folyamatával kapcsolatos, ebben az esetben diffúziós típusú kritikus módustról szokás beszélni [3]. A fázisátalakulások említett két típusa kísérletileg számos anyagnál megfigyelhető, itt csak 1-1 példát említünk meg: a báriumtitanát (BaTiO_3) kristályokban a $T=380\text{ K}$ hőmérsékleten rácsstorzulással járó fázisátmenet zajlik le, míg a KDP (KH_2PO_4) kristályokban $T=123\text{ K}$ hőmérsékleten rend-rendezetlen típusú fázisátalakulás megy végbe.

Az utóbbi évek kutatásainak az eredményei azonban megmutatták, hogy a ferroelektromos fázisátalakulások mindkét típusa egyetlen modell segítségével írható le és közöttük bizonyos értelemben nincs lényeges különbség (lásd, például [4]). Ezt a modellt a legegyszerűbb esetben egy olyan Hamilton operátor írja le, amelyet a két minimummal rendelkező potenciálvölgyben meghatározott egyrészcseke-energiák összege és a különböző cellákhoz tartozó atomok közötti harmonikus erőhatással jellemzett kölcsönhatás eredőjeként állíthatunk elő. Ilyen két minimummal rendelkező egyrészcseke-potenciált szemléltetünk a 3. ábrán. Egy jellegzetesen ferroelektromos kristály, a KDP (KH_2PO_4) esetében például a hidrogénionok lehetséges egyensúlyi helyzetei az $\text{O}-\text{H}-\text{O}$ kötésben egymástól körülbelül $0,35\text{ \AA}$ távolságra vannak,



2. ábra. A báriumtitanát dielektromos szuszceptibilitásának hőmérsékletfüggése [1] alapján



3. ábra. Az aktív ionokra ható egyrészcseke-potenciál

tehát az egyrészcseke-potenciál minimumhelyeinek egymástól való távolságát is ilyen nagyságrendűnek tekinthetjük. A fázisátalakulás jellegének e modell keretében történő közelítő vizsgálata céljából mind a Curie—Weiss-féle molekuláris tér módszert, mind a self-consistent fonon tér módszert egyaránt alkalmazták. Eisenriegler [5] elemezte e két módszer alkalmazásával elért eredményeket és megmutatta, hogy ha az elemi cellák közötti kötési energia kicsiny a cellán belüli potenciálját magasságá-

hoz viszonyítva, akkor a fázisátalakulás jellegét illetően közelebb áll a rend-rendezetlen típusú fázisátalakuláshoz, amelynek konzekvens leírását a molekuláris tér közelítés szolgáltatja, míg ellenkező esetben, vagyis ha a cellák közötti kötés erős, a fázisátalakulás inkább a rácsstorzulással járó fázisátalakulások osztályába tartozik, amelynek konzekvens leírására a self-consistent fonon tér közelítés a megfelelő. Ezt az eredményt könnyen megérthetjük, ha figyelembe vesszük, hogy a rend-rendezetlen típusú fázisátmenetek esetében az aktív atomoknak az ekvivalens egyensúlyi helyzetek közötti statisztikus elrendeződése játszik alapvető szerepet, amelyet a pszeudo-spin modell eléggé pontosan ír le, és az atomok kollektív rezgési állapotainak a hatása kevésbé fontos, addig a rácsstorzulással járó fázisátalakulások osztályában a különböző cellákban levő atomok elmozdulásának a dinamikai korrelációja a jelentős, és ezért a self-consistent fonon tér közelítés bizonyul effektívnek, amely éppen ezeket a korrelációkat képes jó közelítésben számításba venni.

A fentiek alapján abból indulhatunk ki, hogy az atomok mozgását az anharmonikus kristályrácsban mint egyensúlyi helyzetük körüli fonon típusú gyors rezgések és lehetséges egyensúlyi helyzeteik (az egyszerűség kedvéért két lehetséges egyensúlyi helyzetet szokás feltételezni) közötti viszonylag ritka átugrások összességéként foghatjuk fel. A fentiekből következően tehát a ferroelektromos fázisátalakulások következetes tárgyalása céljából egy olyan elméletet szükséges kidolgozni, amely egyidejűleg mindkét mechanizmust egyaránt jó közelítésben figyelembe veszi. Egy ilyen típusú elméletet dolgozunk ki a [6] dolgozatban és ismertettük részletesen magyar nyelven is a [7] tanulmányban.

A ferroelektromos fázisátalakulások általunk javasolt általános modellje keretében mindkét gerjesztési típust — a fononokat és a konfigurációs rendeződést —, egyaránt figyelembe vettük és számítási eljárásunk lehetővé tette, hogy a bevezetett két rendparaméter mindegyikét a számára legjobb közelítő módszer felhasználásával self-consistent módon határozzuk meg.

A ferroelektromos fázisátalakulások általános modelljében az aktív atomok koordinátáit az

$$\vec{S}_i = \sum_{\alpha} \sigma_i^{\alpha} (\vec{b}_i^{\alpha} + \vec{u}_i^{\alpha}) \quad (1.1)$$

alakban írtuk fel. A σ_i^{α} projekciós operátor határozza meg, hogy az i -edik rácspontban levő atom melyik \vec{b}_i^{α} egyensúlyi helyzete körül végzi az \vec{u}_i^{α} termikus rezgést. Ha feltételezzük, hogy minden elemi cellában csak két egyensúlyi helyzet ($\alpha = +1$, $\alpha = -1$) alakulhat ki, akkor a projekciós operátort a szokásos módon kifejezhetjük a pszeudo-spin operátorok segítségével:

$$\sigma_i^{+} = 1 - \sigma_i^{-} = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i^z), \quad (1.2)$$

ahol $\sigma_i^z = \pm 1$. A pszeudo-spin operátorokat, mint új, független változókat vezettük be, amelyek az \vec{S}_i eltolódásoperátorokkal és a \vec{P}_i impulzusoperátorokkal egyaránt felcserélhetők. Az (1.1) képlet fizikai értelmét tisztázandó, emlékeztetünk a kristályrácsban levő atomok koordinátái megadásának általánosan elfogadott módjára. Eszerint a rácsot alkotó atomok koordinátáit az egyensúlyi helyzetük (amely a rácspontok helyét határozza meg) és a dinamikai elmozdulásaik (amelyek statisztikus átlaga: $\langle \vec{u}_i \rangle = 0$) összegeként értelmezzük. Láthatjuk tehát, hogy az (1.1) képlet nem más, mint a rácsot alkotó atomok koordinátái meghatározásának természetes

általánosítása arra az esetre, amikor az elemi cellában az atomoknak több (például két $\alpha = \pm 1$) egyenértékű egyensúlyi helyzetük van. Az atomok koordinátájának a pszeudo-spin változó és a fonon változó összegeként történő felírását Vaks és Larkin [8] javasolta először a rend-rendezetlen típusú strukturális fázisátalakulások vizsgálata céljaira (lásd még [2], 6. §). A [6] tanulmányunkban ezt az előállítást általánosítottuk a rácsstorzulással járó fázisátalakulások esetére.

A ferroelektromos fázisátalakulások általános modellje keretében célszerűnek látszott részletesen tanulmányozni a rendszerben lezajló fázisátalakulások sajátosságait, hogy képet kapjunk a javasolt modell teljesítőképességéről [6], [7], [9], [10]. Vizsgálataink céljára a kristályrácshoz egy, az utóbbi időben többek által is vizsgált egyszerű modelljét [4] használtuk fel, amelyben a rendparaméter egykomponensű, a különböző elemi cellákhoz tartozó atomok párkölcsönhatását harmonikus közelítésben tárgyaljuk:

$$V(\vec{S}_i, \vec{S}_j) = \frac{1}{2} \varphi''_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.3)$$

míg az egyrészeske potenciálnak

$$U(\vec{S}_i) = -\frac{A}{2} \vec{S}_i^2 + \frac{B}{4} \vec{S}_i^4 \quad (1.4)$$

két minimumhelye van. Az A és B paraméterek a potenciálgát magasságát: $U_0 = A^2/4B$ és a két minimumhely közötti távolságot: $2S_0 = 2(A/B)^{1/2}$ határozzák meg.

Megmutattuk, hogy a modellbe bevezetett csatolási paraméter — amely az elemi cellák közötti kölcsönhatás erősségének és a cellákban a potenciálgödör mélységének a viszonyával arányos — értékétől függően lehet a fázisátalakulás rend-rendezetlen típusú, illetve rácsstorzulással járó fázisátalakulás. A csatolási paraméter értékének egy viszonylag szűk átmeneti tartományában a fázisátalakulás kevert típusú.

Azonban a σ_i^z projekciós operátor bevezetése az (1.1) formulában nem tette lehetővé, hogy az atomoknak az egyensúlyi állapotok közötti alagútazását figyelembe vegyük, ennek következtében a pszeudo-spinek rendszerét statikus közelítésben írhattuk csak le az Ising-modell keretében [6], [7], [9]. Ugyanakkor jól ismert tény az, hogy az alagútazással kapcsolatos effektusok a pszeudo-spinek rendszerében is kollektív gerjesztések felléptére vezetnek, amelyek ugyancsak lágy módus jellegűek lehetnek (lásd például [3]) és a centrális csúcs felléptét okozhatják [11], [12]. Ezeknek a gerjesztéseknek a jellegzetes energiája az alapállapotnak az alagútazás miatti felhasadási energiájának: $\hbar\Omega$ a nagyságrendjébe esik és általában lényegesen kisebb, mint a fonon típusú gerjesztések energiája: $\hbar\omega_0$, vagyis $\hbar\Omega \ll \hbar\omega_0$. Ezért ezek az alacsony fekvő gerjesztések meghatározó szerepet játszhatnak az alacsony hőmérsékletek tartományában, ahol $k_B T \sim \hbar\Omega$. A fonon típusú magasán fekvő gerjesztések viszont amellet, hogy a pszeudo-spinek rendszerének paramétereit renormálják, a magasabb hőmérsékletek tartományában a lágy fonon módus által meghatározott rácsstorzulással járó fázisátalakulásokat idézik elő.

Jelen tanulmányunkban a [13]—[15] dolgozataink alapján a ferroelektromos fázisátalakulásoknak az állapotok közötti alagútazását is figyelembe vevő általános modelljét foglalkozunk röviden össze.

2. FÁZISÁTALAKULÁSOK AZ EGYENSÚLYI HELYZETEK KÖZÖTTI ALAGÚTAZÁST IS FIGYELEMBE VEVŐ ÁLTALÁNOS MODELLBEN

Az anharmonikus kristályok dinamikájának modellszerű leírásában célszerű alkalmazni a lokális normálkoordináták módszerét [16]—[18]. Ez a módszer lehetőséget nyújt ugyanis arra, hogy kiválasszuk a kritikus rezgésmódust és a rendszer Hamilton operátorát egyszerű alakban írassuk fel:

$$H = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2m} + U(\vec{S}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{S}_i, \vec{S}_j), \quad (2.1)$$

ahol az \vec{S}_i lokális normálkoordináta leírja az i -edik elemi cellában levő összes atom elmozdulását az adott fázisátalakulás szempontjából kritikus rezgésmódusban, \vec{P}_i az \vec{S}_i -hez konjugált impulzus és m az effektív tömeg. Az $U(\vec{S}_i)$ egyrészcseke és a $V(\vec{S}_i, \vec{S}_j)$ párkölsönhatási potenciál határozzák meg a kritikus rezgések dinamikáját. Nem véve figyelembe a normálmódus esetleges elfajult voltát, feltételezzük a továbbiakban, hogy \vec{S}_i egykomponensű mennyiség.

Kiindulva abból a fizikai képből, amelyet az atomoknak a strukturális fázisátalakulással kapcsolatos mozgásáról a bevezetés végén körvonalaztunk, az \vec{S}_i lokális normálkoordinátát az

$$\vec{S}_i = \vec{r}_i + \vec{u}_i \quad (\langle \vec{u}_i \rangle = 0) \quad (2.2)$$

alakban írjuk fel, ahol \vec{r}_i az egyensúlyi helyzetvektor, amely az egyensúlyi helyzetek közötti alagútaozás következtében a lassú Ω frekvenciával változhat, míg \vec{u}_i az ω_0 rezgésszámú gyors fonon típusú oszcillációkat írja le. Könnyen belátható, hogy a [6] dolgozatban felhasznált (1.1) előállítás a (2.2) felírásmód speciális esete, amikor is $r_i = \sum_{\alpha} \sigma_i^{\alpha} b_i^{\alpha}$.

A független változók számának megkétszereződése jellegzetes a reális kristályok dinamikájának vizsgálata esetében, amikor is az atomok kis amplitúdójú rezgései, a kollektív gerjesztések mellett az egyrészcseke-gerjesztéseket is figyelembe vesszük, amelyek például a vakanciák megjelenéséért, az atomok rácspontok közötti helyzetekbe történő eltolódásaiért felelősek. Megjegyezzük, hogy a (2.2) típusú előállítást sikeresen használták fel a diffúzió és folyadékokban a kollektív gerjesztések leírásánál is (lásd, például [19]).

A (2.1) kiindulási Hamilton operátorba bevezetve a lokális normálkoordináta (2.2) előállítását, az így kapott Hamilton operátor az \vec{r}_i konfigurációs és az \vec{u}_i fonon változók függvényévé vált. A változók szétválasztására a variációs módszert fogjuk felhasználni, e célból a rendszer Hamilton operátorát a fononok részrendszerére és a konfigurációs részrendszerre vonatkozó Hamilton operátorok összegével közelítjük, vagyis

$$H_0 = H_{ph}(\{\vec{u}_i\}) + H_s(\{\vec{r}_i\}) \quad (2.3)$$

a változók szerint szétválasztott próba Hamilton operátor.

Minthogy a fononok rendszere az atomok kis amplitúdójú rezgéseit írja le bizonyos effektív egyensúlyi helyzetek körül, a fononok rendszerének próba Hamilton

operátorát renormált harmonikus közelítésben [20] írjuk fel:

$$H_{ph}(\{\vec{u}_i\}) = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi_{ij} \vec{u}_i \vec{u}_j, \quad (2.4)$$

ahol Φ_{ij} renormált harmonikus erőállandó mátrix a variációs paraméter. A konfigurációs részrendszert pedig, amely az atomok erősen anharmonikus rezgéseit írja le, a

$$H_s(\{\vec{r}_i\}) = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \tilde{U}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} C_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \quad (2.5)$$

Hamilton operátorral közelítjük, ahol a \vec{p}_i impulzus operátor az \vec{r}_i koordinátához kanonikusan konjugált mennyiség, az $\tilde{U}(\vec{r}_i)$ anharmonikus egyrészecske-potenciál és a C_{ij} kötési állandó variációs paraméterek.

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy minden elemi cellában csak 2 egyenértékű egyensúlyi helyzet lehetséges, továbbá, hogy az alapállapot az egyrészecske-potenciál gödörben történő alagúttazás következtében egy szimmetrikus (s) és egy antiszimmetrikus állapotra hasad fel. Ekkor a $\psi_s(\vec{r}_i)$ és a $\psi_a(\vec{r}_i)$ hullámfüggvényekre felírhatjuk a

$$\left\{ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \tilde{U}(\vec{r}_i) \right\} \psi_{s,a}(\vec{r}_i) = \varepsilon_{s,a} \psi_{s,a}(\vec{r}_i) \quad (2.6)$$

Schrödinger-egyenletet. Szokásos módon bevezetve a (2.5) Hamilton operátorba a közismert pszeudo-spin előállítását, könnyen belátható módon a De Gennes-modell Hamilton operátorát kapjuk eredményül [21]:

$$H_s = -\Omega \sum_i \sigma_i^x - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + E_0, \quad (2.7)$$

ahol az Ω , J_{ij} és E_0 mennyiségek az $\varepsilon_{s,a}$, C_{ij} mennyiségek, valamint a $\psi_s(\vec{r}_i)$, $\psi_a(\vec{r}_i)$ hullámfüggvények segítségével kiszámítható $r_{\alpha\beta} = \langle \alpha | r_i | \beta \rangle$ és $r_{\alpha\alpha}^2 = \langle \alpha | r_i^2 | \alpha \rangle$ mátrixelemek segítségével fejezhetők ki ($\alpha, \beta = s, a$).

A Bogoliubov-féle variációs módszernek megfelelően a (2.3) próba Hamilton operátorban szereplő Φ_{ij} , $\tilde{U}(\vec{r}_i)$ és C_{ij} variációs paramétereket abból a feltételből határozzuk meg, hogy a szabadenergia

$$F = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 = k_B T \ln Sp \{ e^{-H_0/k_B T} \} + Sp \{ e^{(F_0 - H_0)/k_B T} (H - H_0) \} \quad (2.8)$$

stacionárius kell legyen, ha variáljuk e paraméterek, avagy a nekik megfelelő korrelációs függvények szerint. A számításokat elvégezve a (2.4), (2.5) és a (2.7) egyenletekben szereplő valamennyi ismeretlen vonatkozásában egy self-consistent egyenletrendszert nyerünk, amely leírja a fononok és pszeudo-spinek rendszerének kölcsönhatását és meghatározza a vizsgált modellben lezajló fázisátalakulások jellegét. A self-consistent egyenletrendszer akkor válik zárttá, ha megadjuk a Hamilton operátor (2.1) kifejezésében szereplő egyrészecske- és párkölcsönhatási potenciál explicit alakját. Ezt a két mennyiséget számításaink során az (1.3) és (1.4) kifejezésekkel megadott módon választjuk meg, mint ahogy azt a [6], [7] tanulmányainkban is tettük. Egyben megjegyezzük, hogy az így megválasztott potenciálokkal felírt modellt

az utóbbi időben mások is tanulmányozták a strukturális fázisátalakulások vizsgálatára során (lásd például [4], [11]).

A dimenzió nélküli spontán polarizációt a

$$P_s(T) = \frac{1}{N} \sum_i \left(\frac{B}{A} \right)^{1/2} \langle \tilde{r}_i \rangle = \left(\frac{B}{A} \right)^{1/2} r_{sa} \sigma_z = \eta(T) \sigma_z(T) \quad (2.9)$$

formula segítségével számíthatjuk ki a vizsgált modell esetében, ahol $\sigma_z(T)$ az átlagos betöltési szám. A dimenzió nélküli átlagos egyensúlyi helyzet az

$$\eta(T) = \left\{ \frac{1-3y}{1-q^2} \right\}^{1/2} \quad (2.10)$$

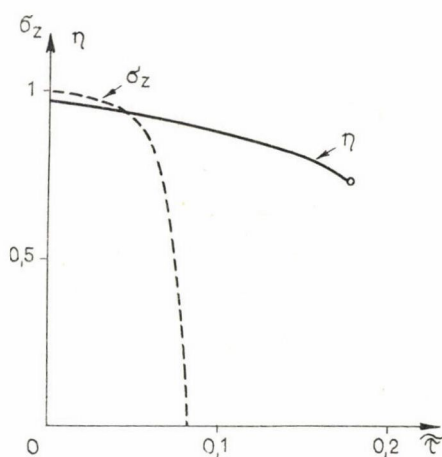
alakban írható fel, ahol $y = (B/A) \langle \tilde{u}_i^2 \rangle$ az atomok hőmérsékleti fluktuációjának négyzetes átlagértéke, q pedig a gerjesztetlen harmonikus oszcillátorok jobb és bal oldali állapotai hullámfüggvényeinek átfedési integrálját jelöli, ezeket a hullámfüggvényeket használták fel ugyanis próba függvényekként, amikor a (2.6) Schrödinger-egyenletet kívánták közelítőleg megoldani [22].

Az $\eta(T)$ és a $\sigma_z(T)$ rendparamétereket a self-consistent fonon tér, illetve molekuláris tér közelítésben határoztuk meg, numerikus módszerekkel megoldva a fentebb említett self-consistent egyenletrendszert a dimenzió nélküli kötési paraméter: $\tilde{f}_0 = (1/\tilde{A}) \sum_j \varphi''_{ij} = \{1/(A-3B \langle \tilde{u}_i^2 \rangle)\} \sum_j \varphi''_{ij}$ és a nullponti rezgések energiáját jellemző, a hőmérséklettől független dimenzió nélküli kvantumparaméter: $\lambda_0 = \omega_0/(A^2/B) = (A/m)^{1/2}/(A^2/B)$ néhány értéke esetében [14], [22].

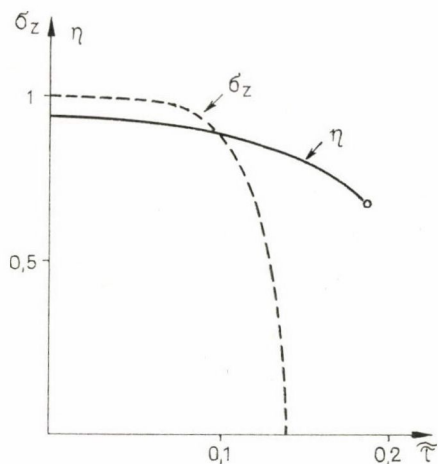
A numerikus számítások eredményeit a 4–7. ábrákon szemléltetjük, bemutatva a $\sigma_z(T)$, $\eta(T)$ és $P_s(T)$ függvényeket a $\lambda_0 = 0,1$ és $\tilde{f}_0 = 0,1; 0,2$; és $0,6$ paraméterértékek esetében. Az η rendparaméter azon értékét, ahol az komplex értékűvé válik, az ábrákon kis körök jelölik. A képzetes gyökök fellépte jellegzetes következménye a self-consistent fonon tér közelítésnek [20]. A 4., 5. és 7. ábrákból láthatjuk, hogy a $\lambda_0 = 0,1$ és az $\tilde{f}_0 = 0,1$ és $0,2$ paraméterértékek esetében rend-rendezetlen típusú fázisátalakulás zajlik le a rendszerben, előbb válik ugyanis zérus értékűvé a σ_z rendparaméter, minthogy az η rendparaméter komplex értéket venne fel. A 6. ábrán a $\lambda_0 = 0,1$ és $\tilde{f}_0 = 0,6$ paraméter értéknél viszont a σ_z rendparaméter még alig változik, $\sigma_z \sim 1$, amikor már fellép a fononok rendszerében a dinamikai instabilitás, így ez az ábra már egy ráctorzulással járó fázisátalakulást mutat be. $\lambda_0 = 0,1$ paraméterérték esetén a fázisátmenet típusának változása $\tilde{f}_0 \sim 0,3$ értéknél következik be. Megjegyezzük, hogy \tilde{f}_0 azon értéke, amelyenél változik a fázisátalakulás jellege, természetesen függ λ_0 értékétől.

A [22] preprintben megtalálhatjuk azokat az eredményeket is, amelyeket a (2.6) Schrödinger-egyenlet közvetlen megoldása segítségével nyertek. A rendparamétereknek a különböző λ_0 és \tilde{f}_0 értékek mellett ez úton nyert hőmérsékletfüggése jól meg egyezik a próba hullámfüggvények felhasználásával elvégzett egyszerűbb számítások eredményeivel, amelyek a 4–7. ábrán láthatók, amíg a q átfedési integrál értéke nem nagy: $q \leq 0,5$.

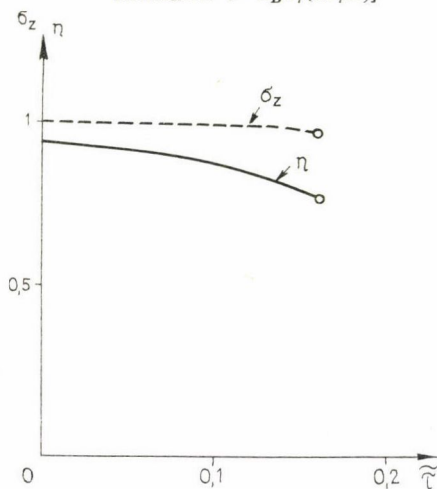
Erős kötés esetében, amikor ráctorzulással járó fázisátalakulást figyelhetünk meg a modellben, az alagútazásból eredő effektusok, várakozásunknak megfelelően, nem bizonyulnak lényegeseknek és ezért ebben az esetben a korábban vizsgált egyszerűbb modell [6], [7], [9] ezeknek a fázisátalakulásoknak kielégítő leírását biztosítja.



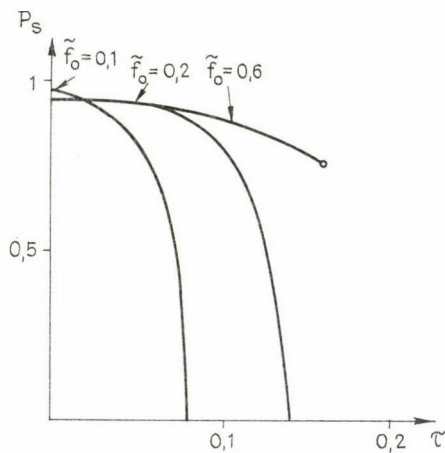
4. ábra. A rendparaméterek: η -átlagos eltolódás és σ_z -átlagos lokalizáció hőmérsékletfüggése a dimenzió nélküli kvantumparaméter $\lambda_0=0,1$ és dimenzió nélküli kötési paraméter $\tilde{f}_0=0,1$ értéke esetén [a redukált hőmérséklet: $\tilde{\tau}=k_B T/(\tilde{A}^2/B)$]



5. ábra. Ugyanaz, mint a 4. ábra az $\tilde{f}_0=0,2$ érték esetében



6. ábra. Ugyanaz, mint a 4. ábra az $\tilde{f}_0=0,6$ érték esetében



7. ábra. A P_s redukált spontán polarizáció hőmérsékletfüggése az \tilde{f}_0 dimenzió nélküli kötési paraméter különböző értékei esetén [a redukált hőmérséklet $\tau=k_B T/(\tilde{A}^2/B)$]

Az alagútazással kapcsolatos effektusok figyelembevétele lényeges eltérésre vezet a [6] és [7] tanulmányok eredményeitől a gyengén kötött rendszerek ($f_0 \ll 1$) esetében az alacsony hőmérsékletek tartományában. A kvantumhatáresetben ($T=0K$) ugyanis [6], [7] eredményétől eltérően, a pszeudo-spinek rendszerének rendparaméte-

rére a (2.7) egyenletből molekuláris tér közelítésben a

$$\sigma_z = \frac{1}{J_0} \sqrt{J_0^2 - \Omega^2}, \quad \sigma_x = \frac{\Omega}{J_0} \quad (2.11)$$

kifejezést nyerjük, ahol $J_0 = r_{s,a}^2 \tilde{f}_0$ és így σ_z a $0 \leq \sigma_z \leq 1$ határok között változhat. Vagyis a nullponti rezgések nemcsak a fononok, hanem a pszeudo-spinek rendszerében is lerombolhatják a rendezett alapállapotot és így a spontán polarizáció (2.9)-nek megfelelően akár a σ_z , akár a η paraméter miatt eltűnhet, attól függően, hogy melyik részrendszerben kisebb értékű a nullponti rezgések energiáját jellemző λ_0 kvantumparaméter. Az 1. táblázatban megadjuk a $\lambda_{0s} = 1/\ln(3/4\tilde{f}_0)$ és a $\lambda_{0ph} = 2\sqrt{\tilde{f}_0}$ értékeket \tilde{f}_0 redukált kötési paraméter néhány értéke esetében.

1. TÁBLÁZAT

\tilde{f}_0	0,05	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50
$\lambda_{0,s}$	0,37	0,50	0,76	1,095	1,59	2,50
$\lambda_{0,ph}$	0,44	0,62	0,89	1,099	1,26	1,40

A táblázatból leolvashatjuk, hogy a kvantumhatáresetben, ha $\tilde{f}_0 < 0,3$ rendezetlen típusú, ha $\tilde{f}_0 > 0,3$ rácsstorzulással járó fázisátalakulás zajlik le, míg $\tilde{f}_0 \sim 0,3$ esetén a fázisátmenet kevert típusú.

3. ÖSSZEFOGLALÁS

A ferroelektromos fázisátalakulások tanulmányunkban tárgyalt modelljét a rend-rendezetlen típusú fázisátalakulások leírására De Gennes által kidolgozott, jól ismert modell általánosításának tekinthetjük. De Gennes modelljétől eltérően, az ε_s és ε_a energiájú nívókra felhasadt alapállapoton kívül az egyrészcseke-potenciál térben levő anharmonikus oszcillátornak az összes gerjesztett állapotait is figyelembe vesszük. Ezeket a gerjesztett állapotokat renormált harmonikus közelítésben mint fonon állapotokat tárgyaljuk, ebben különbözik ismertett modellünk a korábban számos tanulmányban vizsgált három-nívós pszeudo-spin modellektől.

Így egy egységes modell keretében tárgyaljuk a csatolt, erősen anharmonikus oszcillátorok rendszerének meglehetősen bonyolult energia spektrumát előállítva azt mint az alagútazás által keltett alacsonyan fekvő erősen anharmonikus gerjesztések és magasan fekvő fonon típusú gerjesztések összegét. Az utóbbiak gyengébben anharmonikus kölcsönhatás a self-consistent fonon tér közelítésben vesszük számításba. Megjegyezzük, hogy a pszeudo-spin gerjesztéseket tőlünk eltérően, mint a potenciálga-ton történő klasszikus áthaladást tárgyalta Beck [11].

A valóságos fizikai rendszernek a pszeudo-spinek és a fononok rendszerére történő felbontásának az a fogyatéko ssága, hogy a kettős potenciálgödörben levő anharmonikus oszcillátor meglehetősen bonyolult valódi energiaspektrumát (lásd például [11]) eltorzítja, túlságosan leegyszerűsíti, hiszen modellünk keretében az

egyrészecske-spektrumot lényegileg a

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \pm \hbar\Omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.1)$$

egyszerű alakban írhatjuk fel. Minthogy azonban feladatunk megoldására a rendszer szabadenergiája minimalizálását felhasználó variációs eljárást alkalmaztuk, a fent említett fogyatékoság remélhetőleg nem túlságosan jelentős, hiszen az alacsony hőmérsékletek tartományában, amikor is $k_B T \sim \hbar\Omega$ a lényeges járulékot az alag-utazó módus adja, míg a magas hőmérsékletek tartományában, amikor is $k_B T \sim \hbar\omega_0$ a fonon módus $\hbar\Omega \ll \hbar\omega_0$ nagyságrendű járulékos felhasadása nem tűnik lényegesnek. Természetesen modellünk a fázisátalakulásoknak csak interpolációs jellegű leírását adja; abban a hőmérsékleti tartományban lezajló fázisátalakulásokat írjuk le a legpontatlanabban, amelyre fennáll, hogy $k_B T \sim \hbar\Omega \sim \hbar\omega_0$, amikor is a rendszernek két alrendszerre történő felbontása fizikailag nem megalapozott.

Befejezésül meg kívánjuk említeni, hogy a strukturális fázisátalakulások fenti általános modelljének továbbfejlesztését a [23] tanulmányban találhatjuk meg, amelyben az $\eta(T)$ rendparaméter számításakor a nemlineáris effektusokat is figyelembe vették a szerzők, így lehetőségük nyílt jelen tanulmányunkban alkalmazott átlagtér (mean field) típusú közelítésnél jobb közelítést felhasználniuk.

IRODALOM

1. M. E. Drougard, D. R. Young, Phys. Rev. 95, 1152, 1954.
2. V. G. Vaks, Introduction into the Microscopic Theory of Ferroelectricity, Nauka, Moscow, 1973 (in Russian).
3. R. Blinc, B. Žekš, Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics, North-Holland, Amsterdam, Oxford, American Elsevier, New York, 1974.
4. N. S. Gillis, Lattice Dynamics of Ferroelectricity, in „Dynamical Properties of Solids”, (edited by G. K. Horton and A. A. Maradudin) vol. 2. ch. 2. pp. 105–150, North-Holland, Amsterdam, 1975.
5. E. Eisenriegler, Phys. Rev. B9, 1029, 1974.
6. S. Stamenković, N. M. Plakida, V. L. Aksienov, T. Siklós, Phys. Rev. B14, 5080, 1976.
7. T. Siklós, MFF 26, 389, 1978.
8. V. G. Vaks, A. I. Larkin, JETP. 49, 975, 1965.
9. S. Stamenković, N. M. Plakida, V. L. Aksienov, T. Siklós, Acta Phys. Hung. 43, 99, 1977.
10. V. L. Aksienov, H. Breter, J. M. Kovalski, N. M. Plakida, V. B. Priezzhev, Fiz. tverd. tela 18, 2920, 1976.
11. H. Beck, J. Phys. C.: Solid State Phys. 9, 33, 1976.
12. R. Blinc, B. Žekš, R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. B18, 338, 1978.
13. S. Stamenković, N. M. Plakida, V. L. Aksienov, T. Siklós, Fizika (Zagreb) 10, Supplement 2, 122, 1978.
14. S. Stamenković, N. M. Plakida, V. L. Aksienov, T. Siklós, Ferroelectrics, 24, 255, 1980.
15. T. Siklós, Bull. Soc. Sciences, Łódź, (in print); Report KFKI-1981-54, Budapest, 1981
16. E. Pytte, J. Feder, Phys. Rev. 187, 1077, 1969.
17. H. Thomas in „Structural Phase Transitions and Soft Modes” (edited by E. J. Samuelsen, E. Anderson and J. Feder), Universitets Forlaget, Oslo, 1971.
18. M. A. Moore, H. C. W. L. Williams, J. Phys. C.: Solid State Phys. 5, 3185, 1972.
19. V. B. Priezzhev, Acta Phys. Polonica A39, 401, 1971.
20. N. M. Plakida, T. Siklós, Acta Phys. Hung. 45, 37, 1978.
21. P. G. De Gennes, Solid State Comm. 1, 132, 1963.
22. V. L. Aksienov, D. Baatar, N. M. Plakida, S. Stamenković, Report JINR P17—12961, Dubna, 1979.
23. S. Stamenković, N. M. Plakida, V. L. Aksienov, V. A. Zagrebnov, Fizika (Zagreb) 12, Supplement, 1, 332, 1980.

KÖNYVISMERTETÉS

Ehlers J., Hepp K., Kipperhahn, R., Weidenmüller H. A., Zittartz J. (ed.-s):
Topics in Nuclear Physics I—II.
Lecture Notes in Physics 140 and 145, Springer-Verlag, 1981

A Springer Kiadó Lecture Notes in Physics sorozatának 144. és 145. köteteként jelent meg a Kínai Népköztársaságban, Beijing-ben (Peking) 1980. december 20. és 1981. január 9. között tartott nemzetközi magfizikai téli iskola anyaga. A „Topics in Nuclear Physics I—II” című kiadvány alcíme — a legújabb fejlődési irányok széles körű áttekintése — jelzi az iskola szervezőinek célkitűzését is.

Érdekes maga az alapelképzelés is, hogy az országból részt vett több mint 300 magfizikus részére összegyűjtötték az egyes témakörök, kínai származású, legkiválóbb művelőit. (A 14 előadó közül 8 az USA-ból, 3 Kanadából, 2 NSZK-ból és 1 Japánból érkezett.) Ilyen konferencia vagy iskola szervezése elgondolkodtató és igen hasznos példa lehet minden olyan ország számára, amelynek annyi kiválósága él és alkot határain kívül.

A témakör gazdagságát tekintve 3 hét igen rövid idő. Ezért és a nyelvi nehézségek elkerülésére is igen szerencsés gondolat volt, hogy az iskola kibővített, a lehetőségeknek megfelelő maximálisan részletes anyagát angol nyelven megjelentették, kimondottan azzal a céllal, hogy az egyes területekre specializálódott szakembereken kívül mások is könnyen és igen nagy haszonnal olvashassák.

A kétkötetes könyv 1082 oldalas terjedelemben igen széles területet ölel fel. Az I. kötet a magfizika néhány legalapvetőbb témakörével foglalkozik. Itt találjuk a nukleon-nukleon kölcsönhatásokról (C. W. Wong és K. F. Liu), a héjmodell és a statisztikus spektroszkópiáról (S. S. M. Wong), az effektív kölcsönhatások soktest elméleteiről (T. T. S. Kuo) és a gyenge és elektromágneses kölcsönhatások szerepéről (H. C. Lee, W. K. Chang) szóló fejezeteket. A II. kötet a magreakciókkal és néhány egyéb, az érdeklődés előterében álló témával kapcsolatos fejezeteket tartalmazza. Itt olvashatunk a nukleáris cluster-elmélet mikroszkopikus tárgyalásáról (Y. C. Tang), a direkt nehézion reakciókról és ehhez kapcsolódóan a szóráselmélet alapjairól (Q. K. K. Liu) az időfüggő átlagter és a transzport elméletekről az alacsony, a lineáris kaskád, valamint más statisztikus elméletekről a nagy energiájú nehéz-ion ütközések leírásával kapcsolatban (C. M. Kuo), a kölcsönható bozon modellről (A. Arima), a backbending jelenség oszcilláló tulajdonságairól (A. Faessler), az új óriás multipól rezonanciák gerjesztéséről és bomlásairól, (C. C. Chan), a kis gyorsítók széles körű alkalmazási lehetőségeiről (N. Cue) és a stabilitási völgytől távol eső magok fizikájáról (J. K. P. Lee).

A Fejezetek a magfizikából mindkét kötete világos, jól áttekinthető stílusával nélkülözhetetlen ismeretanyagot kínál viszonylag könnyen érthető módon mindenkinek, aki a korszerű magfizika kérdései iránt bármilyen formában is érdeklődik.

Kluge Gyula

Hsiang W. Y., Kobayashi S., Singer I. M., Weinstein A., Wolf J., Wu H. H.:
The Chern Symposium 1979, 259. o. 1980
Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin

A szerkesztők S. S. Chern, a modern differenciálgeometria egyik legkiválóbb úttörője nyugdíjbavonulása alkalmával tartott tudományos ülésszak anyagát gyűjtötték egybe, hogy ezáltal is tisztelegjenek Chern tudományos és pedagógiai érdemei előtt.

A kötetben található cikkeket mind Chern tanítványai írták és a szerteágazó tematika is mutatja, hogy az új differenciálgeometriai munkamódszer, a globális analízis mennyire túlnőtt a szó szoros értelmében vett differenciálgeometrián és az új kutatási területek feltárásában és műve-

lésében milyen centrális szerep jutott neki. Amint a tanulmányok is tanúsítják, e folyamatban Chern nyughatatlan érdeklődésének és pedagógiai kvalitásainak is nagy szerepe volt, illetve van.

A kötet 12 tanulmányt tartalmaz. Néhányat megemlítünk a kimondottan matematikai természetűekből: M. F. Atiyah: Valós és komplex geometria négy dimenzióban — Engenio Calabi: A Kähler-struktúrák izometrikus családjai. A fizikai kutatások szempontjából viszont jelentősek az alábbi tanulmányok: Raoul Bott: Ekvivariáns Morse-elmélet és a Yang—Mills-egyenletek Riemann-felületeken — Louis Nirenberg: Nemlineáris problémák — Chen Ning Yang: Szál-nyelábok és a mágneses monopólusok fizikája — Shing-Tung Yan: Aszimptotikusan sima téridő topológiája és összes tömege.

Abonyi Iván

Kevorkian J. and Cole J. D.: Perturbation Methods in Applied Mathematics
Applied Mathematical Series, Vol. 34.
Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin 1981, 558 o.

Ez a könyv J. D. Cole 1968-ban ugyanezzel a címmel megjelent monográfiájának lényegesen bővített átdolgozása. Célja, hogy azok a matematikusok és fizikusok, akik gyakorlati munkájukban egy fizikai probléma megoldását perturbációs módszerekkel keresik, itt megtalálják azokat az általános elveket is, amelyek a szerteágazó példák konkrét eseteiből tanulsággal levonhatók. A módszerek nemcsak a differenciálegyenletekre, hanem integrálegyenletekre, integrodifferenciálegyenletekre és differencia-egyenletekre is általánosítható. Szerzők a perturbáció-problémák tárgyalásából itt kirekesztik azt a klasszikus eljárást, amely a differenciálegyenletben, vagy a peremfeltételben szereplő kis paraméter függvényében keresi a megoldást, feltéve, hogy a paraméter zérus értéke mellett a megoldás már ismert. Ezt a problémakört ugyanis bőséges irodalom tárgyalja, ugyancsak az önadjungált differenciáloperátor sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek meghatározására szolgáló perturbatív eljárásokat.

Ami a könyv igazi tárgya — és amiben a legmodernebb áttekintést nyújtja, az az a problematika, amelyben a réteg-típusú és kumulatív perturbációs feladatok szerepelnek.

Réteg típusú feladatban a kis paraméter egy olyan tag szorzója a differenciálegyenletben, amely egy peremrétegben (pl. a határretegben) vagy egy tartomány belsejében (pl. a lökésfrontban) nagy lesz és igen gyakran ez a tag a legmagasabb rendszámú derivált az egyenletben. Így a differenciálegyenlet rendje befolyásolja a perturbatív megoldást.

A kumulatív problémánál a kis paraméter szorzója sohasem lesz nagy, azonban a tag szerepe a független változó nagy értékeinél válik jelentőssé.

A könyv kifejtése során a közönséges és parciális differenciálegyenlet elméletének alapjaira támaszkodik. A tárgyalt perturbatív módszerek jó részét a folyadékok mechanikájában dolgozták ki, ezért Szerzők ezen a téren az alkalmazások széles körét mutatják be, de jelentős az égi-mechanika, biomatematika, a nemlineáris rezgések és a hullámterjedés területéről vett alkalmazási példák száma is.

Abonyi Iván

Doebner H. D. (editor): Differential Geometric Methods in Mathematical Physics.
Proceedings of the International Conference, Clausthal, 1978. Lecture Notes in Physics, No 139
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981

A differenciálgeometriai módszerek alkalmazása a matematikai fizikában c. konferencia anyagának összeállítása és közlése azt a célt szolgálja, hogy a fizika és a matematika közötti rendszeressé váljon az eszmecsere, különösen a gravitációra, részecskefizikára és a kvantálási módszerekre alkalmazható differenciálgeometriai és topológiai eredmények terén. A tematika az alábbi kérdések köré csoportosul:

- kvantálási módszerek és speciális kvantumrendszerek, geometriai kvantálás, vektortér és sztochasztikus fázistér kvantálása, a mágneses monopólusok dinamikája, spektrum-generáló csoportok;
- mértékelméletek a klasszikus Yang—Mills-egyenletek fázistere, nemlineáris szigma-modell, speciális mérték-csoportok;
- elliptikus operátorok, spektrál-elmélet, az Atiyah—Singer-tétel alkalmazása a kvantumtérelméletben és a spektrálmélet alkalmazása a fázisátmenetek elméletében;

— geometriai módszerek és a globális analízis, a nem Hansdorff-tereken és nemeuklideszi tereken értelmezett rendszerek, a Weyl-geometria, Lorentz-sokaság, sokaságok és beágyazások.

A konferencia anyagának publikálása nemcsak arra alkalom, hogy a fizikusok és a matematikusok egymás eredményeivel megismerkedjenek, hanem arra is, hogy a problémák és módszerek megismerése a közös kutatásnak új lendületet adjon.

Abonyi Iván

K. Meetz and W. L. Engl: Elektromagnetische Felder
(Mathematische und physikalische Grundlagen, Anwendungen in Physik und Technik)
Hochschultext, 668 p.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1980

Szerzők újszerű vállalkozása, hogy a fizikus és elektrotechnikus főiskolai hallgatók számára szükséges elektromágneses térelmélet-elektrodinamika tananyagot a modern differenciálgeometria eszközeivel tanítják. Ez a „külső szorzat” Grassmann-féle fogalmán, a lineáris formákon, a dualitáskonceptción, a Cartan-féle differenciálformákon az utóbbi évtizedekben kiépült modern differenciálgeometria lehetővé teszi, hogy — bár a tradíció némi feláldozásával — az új nyelven egyszerűbb — tán természetesebb — alakban álljanak előttünk az elektrodinamika törvényszerűségei. Ennek az élménynek azáltal leszünk a részesei, hogy a Szerzők a hagyományos differenciálgeometriai összefoglaló helyett induláskor a geometriai algebra és a geometriai analízis jól kezelhető összefoglalását adják. Az elektrodinamika kiépítésében haszonnal támaszkodnak Gustav Mie koncepciójára, aki az elektrodinamikában bevezette a kvantitás- és intenzitásmennyiségek fogalmát. Az új „nyelven” a Maxwell-egyenletek a nyugvó töltések és stacionárius áramok által keltett terek esetén a legegyszerűbb relációk, amelyek a források és terek között fennállhatnak, a vákuumbeli anyagi egyenletek pedig a legegyszerűbb kapcsolatok, amelyek lehetségesek kvantitás- és intenzitásmennyiségek között a tér geometriai tulajdonságainak alapján. A könyv egyik érdekessége az, hogy az egyenáramú és a váltóáramú hálózatok törvényeit az elektromágneses térelméletből az algebrai topológia módszereivel vezeti be.

A könyv utolsó előtti fejezetét a speciális relativitáselmélet kifejtésének szánták. Itt a geometriai és matematikai koncepciókat a négydimenziós téridőre általánosítják. Az utolsó fejezet a mozgó töltés sugárzásának kérdéseivel, így többek között a sugárzási visszahatással, a Compton-szórás és a fékezési sugárzás klasszikus tárgyalásával foglalkozik.

A könyv valóban „nehezebb” tankönyvi műfaj, hallatlan pozitív értéke viszont: ezen az egyszerű műfajon, az elektrodinamikán tanítja meg a modern differenciálgeometria módszereit. Ennek elősegítése érdekében sok gyakorlati alkalmazásra tér ki és sok feladatot tűz ki.

Abonyi Iván

A. R. W. McKellar, T. Oka, B. P. Stoicheff (ed.-s): Laser Spectroscopy V.
Springer Series in Optical Sciences, 30
Springer-Verlag, Berlin

Az ismertető készítője rövid időn belül a negyedik lézeres spektroszkópiai könyvet tartja kezében, hogy beszámoljon tartalmáról. Igaz, ezek közül csak egy volt valódi könyv, a másik kettő, mint ez is, konferencia tartalmi összefoglalók gyűjteménye.

Mindezek ellenére nehéz ismétléseket felfedezni az egyes művekben, illetve a megfelelő konferenciákon. Ebből több következtetés is levonható. A „modern klasszikus fizika” újrakeletkezésének legforróbb területe lenne a lézeres spektroszkópia? A válasz részben igen, s ennek magyarázatát már a korábbi ismertetések során kifejtettük. Itt inkább a másik indokot említjük meg, mely a lézerspektroszkópiai konferenciák sikerét jelzi. A könyv átlapozása azonnal világossá teszi, hogy a szerkesztők — egyben a konferencia program bizottságának tagjai — komolyabban vették a lézert, mint a spektroszkópia szót. Ez jellemzi a könyvet, és ennek alapján a konferenciát. Úgy tűnik, hogy a kétvétenként a világ eléggé egzotikus (és emiatt sokak számára elérhetetlenül drága) helyein rendezett igazi lézerfizikai konferenciák a Quantum Electronics-ok nem elegendőek az egyre újabb és újabb lézerfizikai eredmények gyors megvitatására. Így a lézeres spektroszkópiai konferencia vállalta a hiánypótló szerepét és címénél lényegesen tágabb programot enged meg a résztvevők és jelen esetben a könyv olvasói számára.

Nézzük tehát az 1981-es év slágereit a lézerek miatt feltámasztott optikában, s az esetleges lézeralkalmazási lehetőségek miatt a fizika igen szételeágazó területein, az 1981. június 29.—július 3-ig Albertában (Kanada) megtartott V. Lézeres Spektroszkópiái Konferencia fényében.

A valóban spektroszkópiái eredmények zöme a természetes vonalszélesség alatti felbontás, a kettős rezonanciák kihasználása, az optikai heterodin technika finomítása és elterjedése, valamint a hangelvezhető, olcsó, félvezető lézereknek mint gerjesztő forrásoknak a felhasználása köré csoportosult. Jelentős eredmények születtek a távoli infravörös lézerek felhasználásával a molekulák gerjesztési állapotainak spektroszkópiájában.

A nem szó szerint vett spektroszkópiái eredmények még ötletlistának, étlapnak is hatalmas területet ölelnek fel. Remélhető, hogy a széles skála sokakban ébreszt kedvet arra, hogy megnézzék, saját területükön milyen szempontok szerint partizánkodnak a lézerek, a nagy intenzitások, a kis mennyiségek hihetetlenül pontos detektálásának, a koherens, kollektív jelenségeknek megszállottai.

Több ismertetés foglalkozik a gravitációs hullámok lézeres kimutathatóságának lehetőségeivel, s a csillagok heterodin spektroszkópiájával.

Külön fejezetet kapott a magasan gerjesztett Rydberg-állapotok, a Rydberg-atomok vizsgálata. Néhai János professzor már nagyon régen felhívta a figyelmet fontosságukra, hisz tudta, hogy előbb-utóbb a kvantumelmélet legfontosabb próbaköveivé válhatnak. Ha időben, kellő megértéssel mellett elkezdődhetek, pontosabban súlyuknak megfelelően folytatódhatnak volna a Rydberg-állapotok hazai vizsgálatai, évtizedes előnyt szerezhetünk volna e fontos területen.

Nem pontosan ide illik, de itt kapott helyet a vákuum kikapcsolásával foglalkozó előadás, mely állítólag később publikálendő kísérleti eredményekről is beszámolt a konferencián. Olyan abszorpciós kísérletekről, melyeket a vákuumfluktuációktól izolált optikai rezonátorban végeztek. Az elmélet éppen a fordított jelenségre a spontán emisszió növelésére, illetve tiltására vonatkozik, előbbire elvégzett, utóbbira javasolt kísérletek (Rydberg-atomokon) taglalásával.

A négyhullámkeverés, fáziskonjugált tükrök más-más címek alatt számtalan előadásban felszínre kerültek, mint a mai lézerfizika egyik legizgalmasabb irányzatai. A rövid hullámhosszú lézerek mellett szó esik a szabad-elektron lézerekről, valamint a legújabb nemlineáris optikai sikeréről, a kétfotonos lézerről.

S végül néhány alapvető fizikai jelenség: spinpolarizált atomok; lézeres hűtés; a felöltöztetett atom közelítés sikerei; elektronok szabad-szabad átmenetei stb.

Befejezésül meg kell említeni a könyv, folyóiratokat megszegyenítő megjelenési gyorsaságát, mely a Spinger-sorozat jellemzőjévé kezd válni. Jellemzésül csak annyit, hogy a december közepén kézbevert könyvet az október 19-én a lézerspektroszkópiái kutatásaikért Nobel-díjban részesített kollégáknak: N. Bloembergennek és A. L. Schawlow-nak ajánlják a szerkesztők.

Horváth Zoltán György

Boris M. Vainshtein:

Modern crystallography I. symmetry of crystals, methods of structural crystallography
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981

Az orosz nyelven 1979-ben megjelent négykötetes sorozat első kötete most a Springer Series in Solid-State Science keretében jelent meg angol nyelven, az eredetihez képest kevés változtatással. A többi három kötet (Structure of Crystals, Formation of Crystals, Physical Properties of Crystals) megjelenése is a közeljövőben várható.

A krisztallográfia eddigi fejlődését három, lényegesen különböző szakaszra oszthatjuk. A morfológiai leírást és osztályozást, a Laue-kísérletet követően, felváltotta az (idealizált) atomi szerkezet meghatározása és természetesen a szerkezet és fizikai tulajdonságok kapcsolatának keresése. Hamarosan kiderült, hogy az idealizált szerkezet ismerete e szempontból vajmi keveset nyújt és az ipari méretű egykristály növesztés és felhasználás megindulásával együtt megindult újabb szakaszban (az ún. anyagtudomány részeként) ma a feladat egyre inkább adott tulajdonságú anyagok „megtervezése” és előállítása. Ez teszi aktuálissá a sorozatot, amelynek célkitűzése *áttekintést adni a krisztallográfia minden területéről*. Ez természetesen, egyszerűen terjedelmi okokból, általában kizárja az olyan részletes tárgyalást, ami szükséges gyakorlati feladatok megoldásához.

A kitűzött célnak a könyv megfelel. Világos megfogalmazásban, kitűnő ábraanyaggal ellátva ismerteti a fogalmakat, viszonylag kevés, de korszerűen alkalmazott matematika felhasználásával. Az első, rövidebb fejezet a kristályos állapot általános leírásával foglalkozik és ezt követi a szimmetriák elméleti tárgyalása (2. fejezetként, a kötet terjedelmének majdnem felében). A 3. fejezet a poliéderek és rácscok geometriáját ismerteti és végül a 4. fejezetben a diffrakciós szerkezetvizsgálati módszerek rövid ismertetését találjuk meg.

Az egyéb, hasonló témájú könyvekhez képest a szimmetriaelmélet itt lényegesen nagyobb súlyt kap, és ez nyilván a klasszikus orosz krisztallográfiai iskola hatása. Mindez azonban inkább előnyére válik, mert a megszokott, elnagyolt tárgyalás helyett, olyan, sok összefüggést feltáró leírást ad, amely a csoportelméleti megfogalmazás mellett gondot fordít a szemléletes, geometriai kép kialakítására is. Több, másutt csak elvétve előforduló kérdés (pl. réteg csoportok, többszintű szimmetriák, statisztikus szimmetriák, cella redukció) ismertetését is megtaláljuk.

A diffrakciós módszerek tárgyalása viszont helyenként meglehetősen vázlatos. Kétségtelen, hogy ez elsősorban olyan témákra áll, amelyekről számos könyvben található bő anyagot (pl. fázisanalízis, rácsparaméter mérés, szemcseméret és rácsdeformáció mérés), de ugyanerre a sorsra jutott a szinkrotron sugárzás is, és valamennyi esetben mindenképpen indokolt lett volna legalább hivatkozni az utóbbi években megjelent közlemények némelyikére. Örömmel láttuk viszont itt is, hogy helyet kapott az a neutrondiffrakció, a röntgen- és elektrondiffrakció dinamikus elmélete (és alkalmazásai), a kisenergiájú elektrondiffrakció, a Mössbauer-diffrakció stb.

Végeredményben jó, gondosan szerkesztett és helyenként kimondottan érdekes könyvet kapunk, amelynél legfeljebb azt hiányolhatjuk, hogy erről-arról miért nem esik több szó, de ilyen széles témakört felölő munkánál ez úgyszólván elkerülhetetlen. Elsősorban egyetemi hallgatóknak és kutatóhelyeken dolgozóknak ajánljuk, nem annyira kézikönyvként, mint inkább olvasmányként a szélesebb körű tájékozódás érdekében. Az alapjelenségek megismerésén már túlevő „kezdő” és az irodalomban jól tájékozott kutató egyaránt fog maga számára hasznos dolgokat találni benne.

Zsoltos Lehel

**H. Haken (ed.): Chaos and Order in Nature
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981**

A szerkesztői előszóból: „Jelen könyv a szinergetikáról 1981. április 27. és május 1. között Schloss Elmau (Bajorország)-ban rendezett nemzetközi szimpózium meghívott előadásait tartalmazza. A témáról szóló korábbi rendezvényeinken érdeklődésünk középpontjában a struktúrák — teljesen különböző tudományágakban való — önszerveződő kialakulása állt. Újabbban kiderült, hogy a „káosz” szóval jellemzett jelenségek ugyancsak fellépnek a különböző területeken és ismét messzemenő analógiák figyelhetők meg egészen különböző rendszerek viselkedésében. Ezért ezt a szimpóziumot nemcsak a rendezett struktúrák fellépésével kapcsolatos kérdéseknek, hanem a kaotikus mozgások leírásában elért legújabb eredmények ismertetésének is szenteltük. A szó matematikai értelmében itt determinisztikus káoszról van szó, azaz determinisztikus egyenletek által leírható irreguláris mozgásról. Míg e viszonylag fiatal kutatási területen a múltban elsősorban, számítógépes kísérletekre és szimulációval nyert eredményekre támaszkodhattunk, addig ez az irányzat most megváltozni tűnik, nevezetesen a káosz általános jellegét analitikus módszerekkel tanulmányozzák. Úgy vélem, e tekintetben a közelmúltban jelentős előrelépés történt. Az elméleti munkával párhuzamosan továbbra is számos szép kísérlet folyik, pl. a hidrodinamikában, a szilárdtestfizikában és a kémiában. Első alkalommal szerepel rendezvényeink témái között a plazmafizika, amely sok érdekesítő problémát vet fel az instabilitásokra, a struktúrák kialakulására, valamint ezekkel kapcsolatos jelenségekre vonatkozólag.” Ehhez csak annyit tehetünk hozzá, hogy a fent jellemzett spektrumon belül új, érdekes eredményeket tárgyaló magvas előadások találhatók a kötetben.

Sz. D.

**J. Della Dora, J. Demongeot, B. Lacolle (editors):
Numerical Methods in the Study of Critical Phenomena
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981**

Jóllehet a kötet fedőlapján a cím második felét: „Study of Critical Phenomena” szedték fel-tűnőbben, az előadásokat mégis inkább a cím első felében szereplő numerikus módszerek alkalmazása köti össze. A dolgozatok a franciaországi Carry-le-Vouet-ban 1980. június 2. és 4. között e kötet címével azonos elnevezésű kollokviumon elhangzott előadások többségét tartalmazza, hol részletekbe menően, hol kivonatossan. A matematikai módszereket alkalmazó előadások a szingularitások, valamint a dinamikai rendszerekben fellépő kritikus jelenségek leírásával foglalkoznak. A gyűjteményben a legnagyobb szerep a fizikai alkalmazásoknak jut (vortex-elmélet, spin-űvegek, frusztrációs és perkolációs modellek, polimerek, ...). Szerepelnek még biológiai, populáció-dinamikai kémiai alkalmazások, és — érdekes lehetőség! — statisztikus mechanikai módszerek alkalmazása telefonhálózatok leírására.

Sz. D.

**H. J. Güntheroth, H. Beck: Glassy Metals I.
Topic in Applied Physics. Vol. 46.
Springer-Verlag, Berlin, 1981**

A Springer kiadó „Topics in Applied Physics” sorozatának 46. köteteként jelent meg az Üvegfémek c. könyv első kötete Güntheroth H. J. és Beck H. szerkesztésében. Az ionszerkezet, elektrontranszport és kristályosodás alcímeket viselő könyv 10 fejezetet tartalmaz, minden fejezetet más szerző, illetve szerzőpáros írt. A válogatás minőségéről — ami a fejezeteket illeti — csak a további kötet megjelenése után lehet nyilatkozni, az egyes fejezetekről már természetesen most: örömmel forgathatja minden féműveg iránt érdeklődő olvasó a világosan, kellő kritikával megírt fejezeteket. Csupán a kevésbé tájékozott olvasó számára kell megemlíteni, hogy nem lezárt, hanem fejlődőben levő tudományterületeket érintenek az egyes fejezetek, így ahol bizonyos hiányokra utalnak a szerzők, ott az utalásokat a további munka orientálása érdekében teszik. A könyv a 10 fejezeten kívül rövid előszót tartalmaz, amiből informálódhatunk a 2. kötet tervezett fejezeteiről; továbbá — tekintettel a gyorsan fejlődő területekre a 6. fejezet kiegészítését, valamint tárgymutatót. A könyv kivételéről annyit feltétlenül el kell mondani, hogy szép kivitelű, jól tagolt, könnyen olvasható, ábrái világosak. Az egyes fejezetekről röviden: Az első bevezető fejezetet a szerkesztőpáros írta azzal az igénnyel, hogy az előállítási technológiától a jellemzésen, az egyes fizikai tulajdonságokon keresztül az alkalmazásokig vázolják mindazokat a lényeges momentumokat és fogalmakat, amelyek a féművegekkel kapcsolatban előfordulnak.

A tudománytörténeti érdekességű 2. fejezet a legilletékesebb, Duwez P. professzor tollából származik, hiteles történetet adja annak, hogy egy jelenségnek — a Cu és Ag fémek szilárdfázisban egymásban való nem-homogén oldódásának — a megkérdőjelezése, ami mellett a kutatók és kohászok ezrei elmentek, miként vezetett egy teljesen új tudomány és technológiai terület felfedezéséhez.

A 3., illetve 4. fejezet a két sokat ígérő röntgenszórás módszert az EDXD (energy dispersive X-ray diffraction) és az EXAFS (extended x-ray absorption fine structure) módszereket és a segítségünkkel elért eredményeket foglalja össze. Egami T., illetve Wong J. tollából. Mindkét módszerhez nagyintenzitású röntgenforrás szükséges; legjobban a szinkrotron sugárzás, ami megfelelő jel/zaj viszonyt, illetve kellően gyors mérést tesz lehetővé. Az utóbbi a szerkezeti relaxáció vizsgálatát is lehetővé teszi. Azzal a konklúzióval zárulnak, hogy nem lehet túlbecsülni a jelentőségüket a féművek vizsgálatában.

Az 5. fejezet a féművek Brillouin-szórásával foglalkozik, a módszer féművegekre való alkalmazása 1978-as keltezésű a felületi fononok tulajdonságainak a felületi és tömb mágneses tulajdonságoknak a meghatározására szolgál. Az 5. fejezet összefoglalja a kísérlet elveit és az eddig kapott eredményeket.

A könyvből a legnagyobb részt a Hafner J. által írott 6. fejezet foglalja el az „Egyszerű féművek dinamikájának, stabilitásának és szerkezetének elmélete” címmel. Az egyszerű fémekből képződő féművek ideális ellenőrzési területet jelentenek az amorf állapot mikroszkopikus elmélete számára. A fejezet áttekinti a tetszőleges szerkezetű binér ötvözetekben fellépő atomok közötti erők konstruálásához használt pseudopotenciál módszereket. Az atomok közötti potenciálok ismerete alapján a szerkezet és termodinamikai tulajdonságok mikroszkopikus számítása végezhető el. A szerző elemzi az atomok közötti potenciálok az amorf szerkezet a fázisdiagram és az üvegpézdési képesség közti összefüggéseket. Az amorf fémek dinamika tulajdonságaira vonatkozó számításokkal, valamint a szerkezet és elektronszerkezet összefüggéseinek elemzésével zárul a fejezet.

A 7. fejezet Cote P. J. és Meisel L. U. munkája a féművek elektromos transzport tulajdonságaival foglalkozik, különös figyelmet fordítva az elektromos ellenállás összetétel- és hőmérséklet-függésének. Nem foglalkozik a mágneses effektusokkal, a könyv egy későbbi fejezetére hagyva azokat. Példáit az amorf fémek különböző osztályaiból veszi. Két elméleti modellt vizsgál meg részletesen, mindkettő a Kubo-formulából származtatható. Az első a Ziman—Faber-elmélet, amelyik nem túl erős szórás esetén érvényes és a szerkezeti effektusokat párkorrelációs függvények segítségével magyarázza. A második a Chen, Weisz, Sher (CWS) elmélet korrektil figyelembe veszi a többszörös szórásokat, mind ez ideig binér rendezetlen ötvözetekre alkalmazták és erős szórócentrumok esetén érvényes. A Ziman—Faber-elmélet kis ellenállású, a CWS elmélet pedig nagy ellenállású ötvözetekre tűnik igaznak. Az amorf fémek transzport tulajdonságainak a teljes megértéséhez azonban segítségül kell hívti az irodalomban közölt számos modell egyikét-másikát.

A 8. fejezetben Black J. L. az üvegekben (vezető és szigetelő) létező, alacsony energiájú gerjesztésekkel foglalkozik. Megállapítja ezen két-nívós rendszerek hasonlóságát a szigetelő fémes üvegekben, és arra a következtetésre jut, hogy a fém és normál üvegek közötti különbséget a két-nívós rendszer és a vezetési elektronok kölcsönhatása okozza. A jelenségnek nincs mikroszkopikus elmélete és a kísérleti eredmények értelmezése során fenomenológikus modellt használtak.

Izgalmas kérdés tehát a kisenergiájú rendszerek univerzális mikroszkopikus leírása; továbbá mindazon kérdések, amelyek ezen rendszerek és a vezetési elektronok kölcsönhatásából erednek féművekben. Még újabb kutatási területet jelent a szupravezetés és a kétnívós rendszerek összefüggése. A fejezet tartalmazza az érdekes kérdéskörhöz tartozó kísérleti eredményeket is.

A 9. fejezet Johnson W. L. munkája, a féművek szupravezetésével foglalkozik. A szisztematikus vizsgálatok történelme 1954-re nyúlik vissza; ez időben a vizsgálatokat hűtött felületre párologtatott amorf fémeken végezték, és azt tapasztalták, hogy a nemkristályos rétegek kritikus hőmérséklete minden esetben magasabb, mint a megfelelő kristályos tömb anyagé; különös megfigyelést okozott a Bi, ami kristályos fázisban nem szupravezető fém, amorf állapotban 6 K-ig szupravezető. Az olvadákból gyorsítással előállított féművek szupravezetésének vizsgálata 1975-ben kezdődött lantán-arany ötvözeteken. Azóta nagyszámú féműveg szupravezetési tulajdonságait határozták meg és azok elméleti és kísérleti jellemzőit táblázatokba foglalva találja az olvasó. A szupravezetés mikroszkopikus elméletével, az elmélet és kísérleti eredmények összevetésével egyszerű és átmeneti fémek esetén foglalkozik a 9.2. alfejezet. A rendezetlenségnek a szupravezető állapot termodinamikai jellemzőire gyakorolt hatását vizsgálja a 9.3. alfejezet a Ginzburg—Landau-elmélet keretein belül, és végül a potenciális alkalmazások szempontjából előnyös tulajdonságokkal ismerkedhetünk meg. Legyen szabad egy elméleti és egy gyakorlati kérdést kiemelni: így választ kap az olvasó arra, hogy miként kell az elektron és fonon állapotok leírását módosítani (általánosítani) a hosszú távú kristályos rend hiányában és a kristály impulzus fogalmának a megszűnése következtében, pl. az elektronállapotok nem írhatók le Bloch-állapotokként. A potenciális gyakorlati alkalmazások egy megközelítését sugallja a féművek könnyű gyárthatósága és hajlékonysága: tehát könnyen elkészíthető a szupravezető mágnes, majd elkészülte után részleges, vagy teljes átkristályosítással alakíthatók ki az optimális tulajdonságok.

Féművek kristályosodásával foglalkozik a 10. fejezet. Köster U. és Herold U. a szerzője.

Nem foglalkozik az amorf fázisban végbemenő relaxációval, ami a „hibamentes” amorf szerkezet kialakulása irányában történik. Ismerteti a lehetséges krisztallációs variánsokat, továbbá azon folyamatokat (nukleáció, krisztallizáció, diffúzió stb.), amelyek fontosak a kristályosodásban, illetve az amorf fémek stabilitásában. Az utolsó oldalakon néhány féműveg kristályosodásának mikromechanizmusait foglalkozik a szerzőpáros.

Befejezésül csupán egyetlen megjegyzés: Azt hiszem minden olvasó kíváncsian várja a jól sikerült könyv második kötetét.

Tompa Kálmán

Enoch J. M., Tobey F. L. Jr. (ed.-s): Vertebrate Photoreceptor Optics
Springer Series in Optical Sciences; Volume 23
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981

A könyv kitűnő összefoglalója az e témában már megjelent közleményeknek és jelenleg is a legmodernebb technikai berendezésekkel, modellekkel vizsgált fényérzékelő mechanizmusnak, amelyek alapján a fotoreceptorral rendelkező élő szervezetek differenciált fényérzékelését mai ismereteink alapján megmagyarázhatjuk.

A szerkesztők munkatársaikkal együtt—H. E. Bedell, G. D. Bernard, B. Borwein, J. M. Enoch, F. I. Hárosi, B. R. Horowitz, J. A. Nicol, F. L. Tobey, Jr., W. Wijugaard, R. Winston — 483 oldalon 11. fejezetben taglalják a fény—sejt; sejt—sejtalkotók, valamint azok kémiai összetétele és struktúrája; a kémiai kompozíciók—idegimpulzusok összefüggéseit. A 164 ábra és a morfológiai képekkel analóg bemutatott optikai modellek szemléletessé teszik, egyben meggyőzően magyarázzák fizikusok számára a biológiai alkotóelemek, struktúrák pontos szerveztségének fontosságát, biológusok számára a hullámvezetés jellemző optikai tulajdonságait. Meggyőződhetünk arról, hogy az emlősök retina (szemideghártya)-receptorai az optikai dielektrikumok valamennyi jellemző paraméterével rendelkeznek. A receptorok és környezetük, mint egy integrált „optikai-egység” szerepel — a szerzők bemutatásában — amely a megfelelő látható jelet megfelelő idegimpulzussá alakítja. Zajszűrés, erősítés, kódolás, jelek és csatornák közötti kölcsönhatás mind e bonyolult rendszer részei.

A retina fotoreceptorainak ezen első rendszerezett analizisének ismerete egyaránt fontos lehet orvosok, biológusok számára, optikai-fiziológiai alapismeretek bővítéséhez.

Solymossy Magdolna

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat nyomdába érkezett: 1982. február 25. — Terjedelem 8,05 (A/5 ív)
82-1095 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bergou János</i> : Elektrodinamika lézerterekben	1
<i>Siklós Tivadar</i> : Rend-Rendezetlenség, alagútazás és fononok a ferroelektromos fázisátalakulások dinamikai modelljében.....	75

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Ehlers J., Hepp K., Kipperhahn R., Weidenmüller H. A., Zittartz J.</i> (ed.-s): Topics in Nuclear Physics I—II	85
<i>Hsiang W. Y., Kobayashi S., Singer I. M., Weinstein A., Wolf J., Wu H. H.</i> : The Chern Symposium 1979	85
<i>Kevorkian J. and Cole J. D.</i> : Perturbation Method in Applied Mathematics	86
<i>Doebner H. D.</i> (editor): Differential Geometric Methods in Mathematical Physics	86
<i>Meetz K. and Engl W. L.</i> : Elektromagnische Felder	87
<i>McKellar A. R. W., Oka T., Stoicheff B. P.</i> (ed.-s): Laser Spectroscopy V	87
<i>Vainshtein Boris K.</i> : Modern Crystallography I.	88
<i>Haken H.</i> (ed.): Chaos and Order in Nature	89
<i>Della Dora J., Demongeot J., Lacolle B.</i> (ed.-s): Numerical Methods in the Study of Critical Phenomena	89
<i>Güntheroth H. J., Beck H.</i> : Glassy Metals I.	90
<i>Enoch J. M., Tobey F. L. Jr.</i> (ed.-s): Vertebrate Photoreceptor Optics	91

307.226

8

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

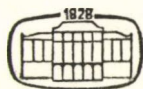
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

9

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

⁶⁵Zn DIFFÚZIÓJA HÍG ALUMÍNIUM ÖTVÖZETEKBE

BEKE DEZSŐ

KLTE, Alkalmazott Fizikai Tanszék, Debrecen

TARTALOMJEGYZÉK

A választott téma tárgya, a vizsgálatok célja	94
I. Irodalmi áttekintés	94
1. A diffúzió fenomenológikus elmélete	94
2. A diffúzió atomisztikus elmélete	97
2.1. Heterodiffúzió tiszta fémekben	97
2.2. Heterodiffúzió híg ötvözetekben	100
2.3. Heterodiffúziós paraméterek becslése	102
2.3.1. A szennyező—vakancia-kölcsönhatás	103
2.3.2. A Le Claire-modell	106
2.3.3. Híg ötvözetek	109
3. Kísérleti előzmények	112
3.1. Cink diffúziója tiszta alumíniumban	112
3.2. Diffúzió híg alumínium ötvözetekben	113
II. Kísérleti technika, eredmények	115
4. A mérések ismertetése, kísérleti eredmények	115
4.1. A próbatetek előkészítése, felületi kezelése	116
4.2. Diffúziós hőkezelések	118
4.3. Szeletelés, a behatolási függvények meghatározása	118
4.4. A mérések lehetséges hibái	121
4.5. Eredmények	124
III. Az eredmények értelmezése	141
5. Mikroszkopikus modellek	141
5.1. Szennyező-diffúzió tiszta alumíniumban	141
5.2. Öndiffúzió híg alumínium ötvözetekben	144
5.3. Szennyező-diffúzió híg alumínium ötvözetekben	145
5.3.1. Cink diffúziója AlZn ötvözetekben	145
5.3.2. Cink diffúziója háromalkotós alumínium ötvözetekben	149
6. Becslések makroszkopikus paraméterek alapján	154
6.1. Szennyező-diffúzió tiszta alumíniumban	156
6.2. Öndiffúzió híg alumínium ötvözetekben	159
6.3. Szennyező-diffúzió híg alumínium ötvözetekben	160
6.3.1. Szennyező-diffúzió kétalkotós alumínium ötvözetekben	160
6.3.2. Szennyező-diffúzió háromalkotós alumínium ötvözetekben	161
7. Összefoglalás	162
Köszönetnyilvánítás	163
Irodalomjegyzék	164

* Kandidátusi értekezés. Érkezett: 1981. március 26. Megvédve: 1981. október 27,

A választott téma tárgya, a vizsgálatok célja

A híg ötvözetekben végzett diffúziós mérések fontos információkat szolgáltathatnak az idegen atomok körül fellépő perturbációk jobb megismeréséhez. A kísérleti eredményeknek az összevetése az irodalomban ismert elméletekkel elősegítheti a szennyezők körüli elektrosztatikus árnyékolás pontosabb megértését. Az első elvekre épülő elméleti modelleken kívül léteznek még eddig elméletileg kevésbé feltárt empirikus és félempirikus összefüggések is. Ez utóbbiak a diffúzióra jellemző mennyiségek és a fém vagy ötvözet termodinamikai paraméterei (pl. olvadáspont, olvadási hő) között fejeznek ki kapcsolatot és értelmezésük, összevetésük a kísérleti eredményekkel elősegítheti a diffúziós együtthatók egyszerű becslésére szolgáló és a gyakorlat (pl. kohászat, hőkezelési technológiák) számára nagyon fontos összefüggések érvényességi körének a megállapítását, illetve az általánosítás lehetőségeinek a feltárását.

Az értekezés témaválasztását a fenti elméleti szempontok mellett az elmúlt évtizedek hazai nagyszabású alumíniumgyártási programja is indokolja. Az eddig gyártott és a gyártmányfejlesztési tervekben szereplő ötvözetekben az előállításuk során alkalmazott alakítások és hőkezelések hatására olyan zónaképződési és kiválási folyamatok mennek végbe, amelyek előnyös mechanikai és egyéb tulajdonságokat eredményeznek. A technológiai folyamatok hőmérséklet- és időadatainak a meghatározásához nagyon fontos az ötvözetben jelenlevő atomok diffúziós jellemzőinek az ismerete, hiszen a hőkezelések során az atomok átrendeződése általában diffúzióval történik.

Az értekezésben ^{65}Zn diffúziós együtthatójának hőmérséklet- és koncentrációfüggését vizsgáltuk radioaktív nyomjelzéses módszerrel tiszta alumíniumban és híg AlZn , AlMg , AlSi , AlCu , AlY kétalkotós, valamint AlZnMg , AlZnSi , AlZnFe , AlZnCu , AlZnY háromalkotós ötvözetekben, szilárdoldat állapotban. Célkítűzésünket az is indokolja, hogy a diffúziós együtthatók mérésére szolgáló kísérleti módszerek közül a legmegbízhatóbbnak tartott radioaktív nyomjelzéses módszerrel ezekben az ötvözetekben eddig nem vizsgálták rendszeresen és részletesen a szennyező-diffúziós együtthatók koncentrációfüggését. A vizsgálatokhoz az ötvözeteket a Fémipari Kutató Intézetben készítették 99,995% tisztaságú alumíniumból.

I. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

1. A DIFFÚZIÓ FENOMENOLOGIKUS ELMÉLETE

Atomi méretű részecskék áramlása, azaz a diffúzió makroszkopikusan az irreverzibilis termodinamika törvényeinek segítségével írható le. Ismeretes [1], hogy termodinamikai egyensúlyban az intenzív mennyiségek értékei az adott rendszer minden pontjában azonosak, és az

$$y_i = y_i(q_1, \dots, q_{n-1}) \quad (1)$$

állapotegyenlet szerint függnek az extenzív mennyiségek sűrűségeitől ($q_k = x_k/V$, $k=1, \dots, n-1$ és $x_n=V$, ahol V a térfogat). Nemegyensúlyi állapotban az extenzív mennyiségek eloszlásában meghatározott változások játszódhatnak le az anyagmeg-

maradást kifejező kontinuitási egyenletnek megfelelően:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_i = q_i, \quad (2)$$

ahol \vec{J}_i és q_i az extenzív mennyiségek áramsűrűségei és forrassűrűségei. A termodinamika II. főtétele szerint, ha egy rendszer állapota nem túlságosan tér el az egyensúlyi állapottól, akkor az extenzív mennyiségek áramai az intenzív mennyiségek gradienseivel lesznek arányosak, vagyis

$$\vec{J}_i = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_{ik} \nabla y_k. \quad (3)$$

Ezt az összefüggést gyakran az Onsager-féle összefüggés néven ismert

$$\vec{J}_i = \frac{1}{\Omega} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \vec{X}_k \quad (L_{ik} = L_{ki}) \quad (4)$$

formában szokták megadni. Itt $\Omega = V/N$ az atomi térfogatot, \vec{X}_k a termodinamikai erőket jelöli és $\vec{X}_T = -(1/T)\nabla T$, $\vec{X}_k = -T\nabla(y_k/T)$, ha $y_k \neq T$ [1], ahol T a hőmérséklet.

Ha a (3), illetve (4) összefüggéseket a diffúziós együttható szokásos definíciójának megfelelő alakba akarjuk írni, akkor fel kell tételeznünk, hogy a kémiai potenciálokon kívül a többi intenzív mennyiség az egész rendszerben állandó. Felhasználva, hogy a μ_k kémiai potenciál K komponensű rendszerben (1) szerint

$$\mu_k = \mu_k(c_1, \dots, c_{K-1}), \quad (5)$$

$$\left(c_l = \Omega q_l = (V/N) x_l/V = x_l/N \text{ és } \sum_{l=1}^K c_l = 1 \right)$$

és hogy állandó hőmérsékleten $\vec{X}_k = -\nabla \mu_k = -\sum_{l=1}^{K-1} \frac{\partial \mu_k}{\partial c_l} \nabla c_l$ (most nyilvánvalóan $k=1, \dots, K-1$)

$$\vec{J}_i = -\frac{1}{\Omega} \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=1}^{K-1} L_{ik} \frac{\partial \mu_k}{\partial c_l} \nabla c_l = -\frac{1}{\Omega} \sum_{l=1}^{K-1} \bar{D}_{il} \nabla c_l. \quad (6)$$

Ebből az összefüggésből, amely egyben tartalmazza a \bar{D}_{il} diffúziós együtthatók általános definícióját is, azonnal látható, hogy ha $\nabla c_l = 0$ minden $i \neq l$ -re, akkor az i fajta atomok áramát a

$$\vec{J}_i = -\frac{1}{\Omega} \bar{D}_{ii} \nabla c_i \quad (7)$$

képlet adja meg.

Felhasználva a kémiai potenciálra az ismert

$$\mu_k = \mu_k^0 + kT \ln \gamma_k c_k \quad (8)$$

kifejezést, ahol k a Boltzmann-állandó, γ_k az aktivitási együttható [2] ((8) második tagja a keverési entrópia járulék), valamint feltéve, hogy $L_{ik} \frac{\partial \mu_k}{\partial c_l} = 0$, ha $i \neq k$,

a (6)-ból adódó

$$\bar{D}_{ii} = \sum_{k=1}^{K-1} L_{ik} \frac{\partial \mu_k}{\partial c_i}$$

definícióból következik, hogy

$$\bar{D}_{ii} = \frac{kT}{c_i} L_{ii} \left(1 + \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial \ln c_i} \right) = kTM_{ii}\beta_{ii} = D_{ii}\beta_{ii}, \quad (9)$$

ahol $M_{ii} = \frac{L_{ii}}{c_i}$ a mozgékonyosság. Ideális oldatokban, ahol $\gamma_i = 1$, a Fick I. törvénye néven ismert

$$\vec{J} = -\frac{1}{\Omega} D \nabla c \quad (10)$$

kifejezés és a

$$\vec{J}_i = -\frac{1}{\Omega} D_{ii} \nabla c_i - \frac{1}{\Omega} D_{ii} \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial \ln c_i} \nabla c_i \quad (11)$$

összefüggés alapján $D_{ii} = D$, minthogy most (11) második tagja zérus. A hagyományos definíció szerint tehát a diffúziós együttható a részecskék statisztikus bolyongására jellemző mozgékonyossággal arányos. Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy (11)-ben az első tag annak felel meg, amikor a diffúziós zónában egy kiszemelt felület egyik oldalán több atom van, mint a másikon és az eredő atomi áram úgy jön létre, hogy közben az egyes atomi ugrások minden irányban azonos valószínűségűek.

A Fick I. törvényének megfelelő (10) kifejezést (2)-be helyettesítve és feltételezve, hogy $q_i = 0$, Fick II. törvényét kapjuk:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c). \quad (12)$$

A diffúziós együttható (amely általános esetben tenzor) bizonyos — kísérletileg is megvalósítható körülmények között — skalárra egyszerűsödik és a helytől is függetlennek tekinthető. Ekkor (pl. köbös kristályokban) a (12) egyenlet a

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (13)$$

alakba írható. Számos diffúziós vizsgálat során igyekeznek olyan körülményeket teremteni, hogy a (13) alakú egyenlet teljesüljön. A későbbiekben látni fogjuk, hogy vizsgálatainkban is fennálltak ezek a feltételek, és az általunk elemzett problémához tartozó csaknem valamennyi kísérleti adatot is ilyen mérésekből nyerték. Ezért a további fejezetekben csak a (13), illetve az ennél is egyszerűbb, a lineáris geometriára érvényes

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (14)$$

alakú egyenlettel foglalkozunk.

A következő fejezetben megmutatjuk, hogy a diffúzió atomisztikus elmélete a (11) első tagjában szereplő, a statisztikus bolyongásra jellemző, diffúziós együtthatók értelmezését tudja megadni. Ezért alapvető fontosságú olyan kísérleti körülmények

mények létrehozása, hogy — (14) érvényessége mellett — a mért effektív együtt-hatók megegyezzenek D_{ii} -vel. Ilyen célra a radioaktív nyomjelzéses módszer (a tracer technika) a legalkalmasabb. Tracer öndiffúziós együtttható mérésekor a tiszta A anyagban az A^* tracer atomok diffundálnak és ekkor nyilvánvalóan $\beta_{ii}=1$, azaz (11) második tagja zérus. Ez a feltétel közelítőleg akkor is teljesül, ha a diffundáló atomok egy B anyag izotópjai, minthogy nyomjelzéses technikánál a B^* atomok koncentrációja olyan kicsi, hogy a létrejövő A alapú ötvözet csaknem végtelen hígnek tekinthető.

Az ilyen eljárással mért diffúziós együttthatók azonban még így is különbözni fognak D_{ii} -től. Ekkor ugyanis nem teljesül a (9) levezetésekor alkalmazott feltétel, hogy a keresztteffektusok elhanyagolhatók, azaz, hogy $L_{ik} \frac{\partial \mu_k}{\partial c_i} = 0$, ha $i \neq k$. Vakancia mechanizmus esetén három áram keletkezik (pl. $\vec{J}_A, \vec{J}_{A^*}, \vec{J}_v$), amelyek között fennáll a $\sum_{i=1}^3 \vec{J}_i = 0$, feltétel (az L_{ik} együttthatók ugyanis (4)-ben nem függetlenek: $\sum_{k=1}^3 L_{ik} = 0$ $i=1, 2, 3$). Felhasználva, hogy ilyen méréseknél a vakanciák kvázi-egyensúlyban vannak a ráccsal ($\vec{J}_v = 0$, azaz eredő vakancia áram nincs), a Gibbs—Duhem-reláció segítségével könnyen megmutatható (lásd pl. [3]), hogy

$$\vec{J}_A = \frac{1}{\Omega} kT \left(\frac{L_{AA}}{c_A} - \frac{L_{AA^*}}{c_{A^*}} \right) \nabla c_{A^*} \quad (15)$$

$$\vec{J}_{A^*} = -\frac{1}{\Omega} kT \left(\frac{L_{A^*A}}{c_{A^*}} - \frac{L_{AA^*}}{c_A} \right) \nabla c_{A^*},$$

és $\vec{J}_A = -\vec{J}_{A^*}$. Ennek alapján

$$D_{A^*}^{\text{eff}} = kT \left(\frac{L_{AA}}{c_A} - \frac{L_{AA^*}}{c_{A^*}} \right) = f_0 D_{AA} \quad (16)$$

és

$$f_0 = 1 - \frac{c_A}{c_{A^*}} \frac{L_{AA^*}}{L_{AA}}. \quad (17)$$

A következő fejezetben látni fogjuk, hogy az f_0 korrelációs faktor atomisztikusan is definiálható, és így a tracer technikával mért együttthatók atomisztikus értelmezését egzakt módon meg lehet adni. Az ilyen típusú vizsgálatok technikai megvalósítását az 5. fejezetben ismertetjük részletesebben.

2. A DIFFÚZIÓ ATOMISZTIKUS ELMÉLETE

2.1. Heterodiffúzió tiszta fémekben

Ebben a fejezetben a heterodiffúzió olyan egyszerű eseteit vizsgáljuk, amikor B^* radioaktív nyomjelző (tracer, jelzett) atomok diffundálnak tiszta A anyagban (ez a *szennyező diffúzió*). Ha speciálisan B^* az A atomok valamely izotópja, akkor tracer *öndiffúzióról* beszélünk. Most először ezt tárgyaljuk.

A statisztikus bolyongás elméletéből meg tudjuk adni a következő probléma megoldását. Az origóban nagyteljesítményű pillanat-forrás helyezkedik el és a részecskékről feltételezzük, hogy statisztikusan mozognak. Keressük az origótól mért távolság négyzetének várható értékét, $\overline{R^2}$, ha minden részecske n számú ugrást végzett és egy ugrás távolsága α . A megoldást a jól ismert [4]

$$\overline{R^2} = n\alpha^2 = \Gamma t\alpha^2 \quad (18)$$

összefüggés adja meg, ahol Γ a vándorló részecskék időegység alatt végzett ugrásainak a száma, azaz az ugrási frekvencia.

Az origóban működő pillanatforrás egyébként a (13) egyenlet egy lehetséges kezdeti- és határfeltételét is megadja. Megkeresve az ehhez tartozó $c(r, t)$ megoldást — amely paraméterként tartalmazza D -t — az $\overline{R^2}$ mennyiség elemi meggondolások alapján megadható: $\overline{R^2} \sim Dt$ [4]. Ezt (18)-al összevetve a

$$D = \gamma r_0^2 \Gamma \quad (19)$$

összefüggésre jutunk, ahol γ a rácsszerkezettől függő állandó (értéke pl. felületen középpontos köbös rácsra $1/12$) és r_0 a rácsállandó.

A diffúzió atomisztikus elméletében azt vizsgáljuk, hogy a kristályban az atomok vándorlása milyen mechanizmusok útján valósulhat meg, és hogyan lehet meghatározni a Γ ugrási frekvencia értékét.

Fémekben az atomok vándorlása lejártsódhat külső felületek, szemcsehatárok vagy diszlokációk mentén, valamint a test belsejében. Ez utóbbi folyamatot nevezzük térfogati diffúciónak és az alábbiakban csak ezzel foglalkozunk. Minthogy az általunk kísérletileg is vizsgált ötvözetek felületen középpontos köbös szerkezetűek (fkk), a következőkben csak az ilyen kristályokban domináns vakancia mechanizmust tárgyaljuk részletesen. Felsorolás szerűen említjük meg a többi ismertebb atommozgási mechanizmust: — intersticiális mechanizmus (a kiszemelt atom rácsközi helyeken át mozog) —, közvetett intersticiális mechanizmus (intersticialcy) — crow-dion mechanizmus — helycserés mechanizmus. Ezek közül az intersticiális mechanizmus fémekben a nemfém alkotók mozgásában a gyakorlatban is fontos, a többieknek inkább csak elvi jelentőségük van [4, 5, 6].

Tiszta anyagokban a tracer technikával mért öndiffúziós együttható (D_A^{eff}) szintén egy (19) alakú összefüggésből kapható, de a kifejezésben még egy f_0 korrelációs faktor is fellép. Ennek értéke öndiffúzióra állandó (fkk fémekben 0,78) és azt fejezi ki, hogy az ugrások egy része a bolyongás során „hatástalan”, mert a tracer atom, újra helyet cserélve a vakanciával, bizonyos valószínűséggel eredeti helyére is visszaugorhat. Öndiffúzióra a tracer atomok ugrási frekvenciáját a

$$\Gamma = \omega_v \cdot c_v \quad (20)$$

alakban írhatjuk fel [4], ahol ω_v a vakanciák ugrási frekvenciája és c_v a vakancia előfordulási valószínűsége, azaz a vakancia koncentráció.

Tiszta fémekben c_v -t egyensúlyi termodinamikai meggondolások — a G szabadentalpia minimalizálása — alapján lehet meghatározni (lásd pl. [3, 4]). Ebből

$$c_v = \exp(S_v/k) \exp(-H_v/kT) \quad (21)$$

adódik, ahol S_v és H_v az egy vakancia keltéséhez szükséges képződési entalpiát és entrópiát jelenti.

Az ω_v ugrási frekvenciát az „abszolút reakciósebességek” elmélete alapján határozhatjuk meg [7]. Ahhoz, hogy egy atom át tudjon haladni két egyensúlyi rácshelyet elválasztó nyeregponti helyzeten, olyan termikus fluktuációra van szükség, amely fedezni tudja az ehhez szükséges energiát. Wert és Zener [8], valamint Wert [9] Eyring reakciósebességi elméletét alkalmazva erre az ugrási folyamatra az

$$\omega_v = v_0 \exp(S_m/k) \exp(-H_m/kT) \quad (22)$$

összefüggést vezette le, ahol S_m , illetve H_m egy ugráshoz tartozó mozgási entrópia, illetve entalpia. A v_0 frekvencia pontosabb értelmezéséhez Vineyard [10] járult hozzá szabatos statisztikus fizikai tárgyalást alkalmazva, és azt kapta, hogy

$$S_m = -k \cdot \ln \frac{\prod_{i=1}^{3N} v_i}{\prod_{i=1}^{3N} v_i^m}, \quad (23)$$

ahol v_i , illetve v_i^m a rendszer alap- és nyeregponti helyzetéhez tartozó normálrezgések frekvenciái és (22)-ben v_0 annak a normálrezgésnek a frekvenciája, amelyhez tartozó rezgési szabadsági fok, ha a rendszert megzavarják, megszűnik és bekövetkezik az atomi ugrás [11].

Az atomi ugrások „dinamikus” elméletének (lásd pl. [12, 13] és [14]) kidolgozását az indokolta, hogy több szerző szerint megalapozott a (22) és (23) képletek levezetésénél az egyensúlyi statisztikus fizika alkalmazása. Későbbi elméleti vizsgálatok kimutatták, hogy a reakciósebességi elmélet — néhány extrém kivételtől eltekintve — megfelelő a diffúziós ugrások leírására [15]. Ma már az is nyilvánvaló, hogy a két módszer gyakorlatilag azonos eredményt ad [13]. A dinamikus elméletből itt talán csak azt érdemes kiemelni, hogy a v_0 frekvenciát a

$$v_0^2 = \frac{\sum_{k=1}^{3N} a_k^2 v_k^2}{\sum_{k=1}^{3N} a_k^2} \quad (24)$$

alakban lehet megadni, ahol a_k jelenti egy-egy normálrezgésnek az ugrás irányába eső iránykoszinuszát. Tiszta anyagban a normálrezgések ismeretében a (24) szerinti átlagolás elvégezhető

$$v_0 = (3/5)^{1/2} v_D,$$

ahol v_D a Debye-frekvencia [12].

A (19), (20) kifejezésekből (21) és (22) segítségével a tracer öndiffúziós együtthatóra a

$$D_{A^*}^{\text{eff}} = D_0 = \gamma r_0^2 f_0 v_0 \exp\left\{\frac{S_v + S_m}{k}\right\} \exp\left\{-\frac{H_v + H_m}{kT}\right\}. \quad (25)$$

Megmutatható [16], de a fentiek alapján várható is, hogy a szennyező-diffúziós együttható tiszta fémekben (25)-höz hasonló alakban írható fel

$$D_{B^*}^{\text{eff}} = D_i = \gamma r_0^2 f_i v_{0i} \exp \left\{ \frac{S_{vi} + S_{mi}}{k} \right\} \exp \left\{ -\frac{H_{vi} + H_{mi}}{kT} \right\}, \quad (26)$$

ahol az entrópiák és entalpiák a szennyező melletti vakancia-képződésre, illetve a szennyező-vakancia helycserére vonatkoznak. f_i a szennyező korrelációs faktor, amely szennyezőről szennyezőre más lehet és függhet a hőmérséklettől is, hiszen annak a valószínűsége, hogy a szennyező visszaugrik az eredeti helyére a szennyező és a vakancia közötti kölcsönhatási energiáknak és a kT termikus energiának a hányadosaitól függ [16].

A kísérleti tények megerősítik, hogy tiszta fémekben vagy ötvözetekben (néhány anomális diffúziós viselkedésű tkk fémek kivéve [13]) a mért diffúziós együtthatók hibahatáron belül kielégítik az Arrhenius-típusú

$$D = D_0 \exp(-Q/kT) \quad (27)$$

hőmérsékletfüggést [6, 17]. Ez azt jelenti, hogy az f_i korrelációs faktor hőmérsékletfüggését (26)-ban egy $\exp(C/kT)$ alakú tényezővel lehet kifejezni, ahol C független T -től. (27)-ben szereplő D_0 és Q neve a diffúziós irodalomban preexponenciális faktor és aktivációs entalpia. Ezeket lehet kísérletileg közvetlenül meghatározni a diffúziós együttható hőmérsékletfüggéséből. Öndiffúzióra $Q = H_v + H_m$, míg szennyező-diffúzióra tiszta fémekben

$$Q_i = H_{vi} + H_{mi} - C. \quad (28)$$

2.2. Heterodiffúzió híg ötvözetekben

Az előző fejezetben leírt összefoglalás alapján várható, hogy a (tracer) heterodiffúziós együtthatók ötvözetekben szintén (25), ill. (26) szerinti alakban írhatók fel, csak most a megfelelő mennyiségek ($r_0, f_0, v_0, S_v, S_m, H_v, H_m$) függeni fognak a koncentrációtól [11, 18].

Az ötvöző és ötvözött anyag atomjainak tracer diffúziós együtthatóira $D_{A^*}(c)$ és $D_{B^*}(c)$ az A alapú AB ötvözetben kis koncentrációnál a

$$D(c) = D(0) [1 + bc], \quad (29)$$

míg nagyobb koncentrációknál a

$$D(c) = D(0) \exp(\beta c) \quad (30)$$

alakú közelítő kifejezéseket találták érvényesnek kísérletileg [5]. Ezek az empirikus összefüggések azonban nem bizonyultak általánosoknak, nagyon sok fémötvözetben (különösen 5–10 at%-nál nagyobb koncentrációkra) a diffúziós együtthatók koncentrációfüggése szinte ötvözetről ötvözetre más, nem írható le az egyszerű (29), illetve (30) összefüggésekkel [6, 17].

Az ötvöző és ötvözött atomok (tracer) diffúziós együtthatóira kísérletileg kapott (29) alakú lineáris összefüggést a következő modellek segítségével lehet kvalitatíve értelmezni. Vakanciákat és egyfajta ötvöző atomokat tartalmazó híg ötvözetben az

n darab vakanciából és m darab ötvöző atomból álló *komplexek* egyensúlyi koncentrációját a tömeghatás törvényét kifejező

$$c_{nm} = a_{nm} c_{10}^n c_{01}^m \quad (31)$$

összefüggés adja meg [12], ahol c_{10} a vakanciák és c_{01} az izolált ötvöző atomok koncentrációja (c_{10} -t most is a (21) képlet adja meg), az a_{nm} egy geometriai és egy entrópia faktortól eltekintve $\exp(B_{nm}/kT)$ alakú kifejezés, amelyben B_{nm} az (nm) komplex képződésekor felszabaduló szabad entalpia. A tracer diffúziós együttható koncentrációfüggését az fogja meghatározni, hogy az atom a bolyongás során milyen — szabad vagy komplexben kötött — vakanciákat használ fel és milyen arányban. Ezeket az arányokat — termikus egyensúlyban — közelítőleg a c_{nm}/c_{10} hányadosok adják meg (ha az összes vakanciák számára teljesül, hogy $\sum_{n,m} nc_{nm} \sim c_{10}$).

(31) és (21) alapján nyilvánvaló, hogy ezek a hányadosok függenek a hőmérséklettől, azaz a hőmérséklet változtatásával a megfelelő komplexek hatásának mértéke is változik a diffúziós együtthatóban. Például a divakanciák szerepe növekvő hőmérséklettel növekszik, míg — ha $B_{12} > 0$ — a két szennyező-vakancia hármasok szerepe alacsonyabb hőmérsékleten nagyobb. (31)-ből az is látható, hogy n és m növekedtével az adott komplex relatív szerepe is kisebb ($c_{10} \sim 10^{-4}$ az olvadásponton, és híg ötvözetekben $c_{01} \sim 10^{-2}$).

Ha csak az ötvöző atom-vakancia párok jelenlétét vesszük figyelembe a tracer pályájára végzett átlagolás alapján

$$D_{A^*}(c) = D_{A^*}(0) (1 + bc) \quad (32)$$

adódik és b nyilvánvalóan függvénye lesz a B_{11} energiának és az ötvöző környezetében megváltozott mátrix atom-vakancia ugrási frekvenciáknak. Ha a két ötvöző-vakancia hármasokat is figyelembe vesszük

$$D_{A^*}(c) = D_{A^*}(0) (1 + bc + b'c^2 + \dots), \quad (33)$$

ahol b' már bonyolult függvénye lesz B_{11} -nek, B_{12} -nek, valamint az ötvöző—vakancia pár, illetve a két ötvöző—vakancia hármas környezetében megváltozott ugrási frekvenciáknak [19]. A helyzetet bonyolíthatja, hogy ilyen közelítésben már a divakancia—ötvöző hármasok sem elhanyagolhatóak. Szerencsére az utóbbi komplexek hatása csak magasabb hőmérsékleten jelentősebb, így a (33) jó közelítésnek tekinthető általában már $T \sim 0,85T_m$ hőmérsékleteknél is, ahol T_m a *tiszta alapanyag* (mátrix) olvadáspontja.

Az ötvöző diffúziós együttható csak akkor függ a koncentrációtól, ha legalább a két ötvöző—vakancia hármasokat figyelembe vesszük. Ekkor

$$D_{B^*}(c) = D_{B^*}(0) (1 + b_i c + \dots), \quad (34)$$

ahol b_i nyilvánvalóan függ B_{12} -től, valamint az ötvöző ugrási frekvenciáinak a komplexben való megváltozásaitól [20, 21]. Érdekes megjegyezni, hogy nem egyensúlyi körülmények között (például hirtelen leedzés után) lejátszódó atommozgási folyamatokra nem érvényesek a fenti megfontolások. Ilyenkor ugyanis az első pillanatokban a kiindulási hőmérsékletnek megfelelő vakancia koncentráció van jelen az anyagban, és az ennek megfelelő komplexek fordulnak elő. A kezdeti változások nyilvánvalóan erős komplexképződéshez vezetnek, amelyek során viszonylag

nagy számú magasabbrendű komplex keletkezhet, és eközben a vakanciák is igyekeznek a lehetséges nyelőkön eltűnni. Tehát az egyensúlyi esetre vonatkozó meggondolások olyan mérések kiértékeléséhez közvetlenül nem alkalmazhatók, amelyekben közvetett vagy közvetlen módszerrel a leedzés utáni változásokat követjük. Ugyanakkor tracer diffúziós mérések során a tracer atomnak egy termikus egyensúlyban levő ötvözetben való bolyongása alapján szerzünk információkat, és ezek segítséget nyújthatnak például éppen a leedzés utáni folyamatok pontosabb megértéséhez.

2.3. Heterodiffúziós paraméterek becslése

Az öndiffúziós aktivációs entalpia fizikai alapelvekből történő (azaz a fémes kötés elméletéből kiinduló) kiszámolására az első klasszikus munkák még a negyvenes-ötvenes években születtek [4]. Ezek és az azóta publikált hasonló eljárások (lásd pl. [22]), ahol pszeudopotenciál módszert alkalmaztak) a H_v , H_m , illetve az S_v és S_m mennyiségeket számolták ki és, bár erős közelítésnek tekinthetők a felhasznált egyszerűsítő feltételezések miatt (a kísérleti eredmények pontossága például 1–2%, míg a becslések 30%-ra tekinthetők jónak), megadták a H_v , H_m , illetve S_v és S_m mennyiségekben fellépő alapvető járulékokat, és lehetőséget adtak annak elméleti eldöntésére, hogy fémekben a vakancia mechanizmus a legvalószínűbb. Míg a fizikai alapelvekből kiinduló számolások nehézségei nem nagyon csábították a fémfizikával foglalkozó fizikusokat, a kísérleti adatok feldolgozása során olyan empirikus szabályokra akadtak, amelyek pontos teljesülésének okai sokáig nem voltak világosak. Azt tapasztalták ugyanis, hogy az aktivációs energia arányos az olvadásponttal

$$Q = \eta T_m, \quad (35)$$

ahol η csak a rácsszerkezettől függő állandó, és hogy ez a szabály 20%-nál pontosabban teljesül. Hasonló empirikus összefüggés a Zener-szabály [23]

$$S_v + S_m = \lambda Q / T_m = \lambda \eta \quad (36)$$

is, ahol λ szintén csak a rácsszerkezettől függő állandó.

Geszti mutatta meg [24], hogy a (25) összefüggés az atomközi potenciálok hasonlóságának a következménye. A rács potenciális energiáját ugyanis az

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \varepsilon U^*(\vec{r}_1/r_0, \dots, \vec{r}_N/r_0) \quad (37)$$

alakba írhatjuk, ahol az ε paramétert jól skálázza a T_m olvadáspont. Mivel a H_v és H_m entalpiák kifejezhetők $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ homogén lineáris függvényként, a Q is arányos ε -nal, azaz T_m -mel. Az arányossági tényező pedig éppen úgy mint $U^*(\vec{r}_1/r_0, \dots, \vec{r}_N/r_0)$ csak a rácsszerkezettől függ. Ez azt is jelenti, hogy a $H_v = \alpha T_m$ és a $H_m = \gamma T_m$ összefüggések is teljesülnek, és nyilvánvalóan $\alpha + \gamma = \eta$.

Szennyező diffúziós együtthatók értelmezésénél D_i -nek az öndiffúziós együtthatótól való eltérését két okra szokás visszavezetni. Egyrészt a szennyező által a rácsban okozott (elektromos és rugalmas) perturbációk miatt megváltozik H_v és H_m , illetve S_v és S_m , valamint v_0 értéke, másrészt — mint már említettük — a korrelációs faktor értéke szintén megváltozik, sőt függ a hőmérséklettől is. Elméletileg csak a

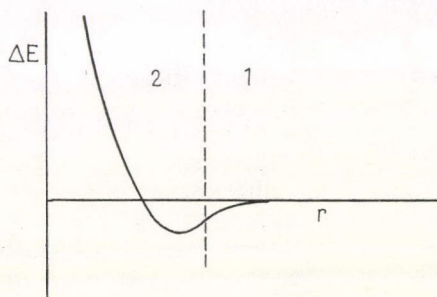
$$\Delta Q = Q_i - Q = \Delta H_{vi} + \Delta H_{mi} - C \quad (38)$$

különbség becslésére szoktak vállalkozni, a preexponenciális faktorok közötti eltérésre inkább csak kvalitatív magyarázatok vannak [16, 25].

Mielőtt az irodalomban eddig közölt modelleket röviden áttekintenénk, a modellek kulcsproblémájával a szennyező—vakancia kölcsönhatási energiák becsléséhez szükséges szennyező—körüli effektív potenciál meghatározásával foglalkozunk.

2.3.1. *A szennyező—vakancia-kölcsönhatás*

A téma irodalma igen kiterjedt, ezért itt csak a dolgozat tárgyához kapcsolódó főbb kérdések vázlatos áttekintésére vállalkozhatunk. (Megemlítjük, hogy színvonalas összefoglalás található *N. H. March* cikkében [26].) A szennyező—vakancia-kölcsönhatás tárgyalását nehezíti, hogy míg egy izolált szennyező (SZ), illetve vakancia (V) a rácsban gömbszimmetrikus perturbáció, amelynek megoldásait lényegében ismertnek vehetjük, addig egy SZ—V pár eleve hengerszimmetrikus perturbációt jelent. A két hiba kölcsönhatását analóg módon lehet kezelni mint fémes közegbe merülő molekulában levő atomok közötti kölcsönhatást [26]. Ennek az analógiának megfelelően a részecskék közötti kölcsönhatást a közöttük levő távolság függvényében két tartományra lehet osztani (1. ábra). Az 1. tartományban gyenge kölcsönhatások érvényesülnek, amelyet a molekulafizikai analógiának megfelelően az izolált részecskék tulajdonságai határoznak meg. A második, az erős kölcsönhatások tartományában az individuális részecskéket már nem lehet azonosítani, elektron újraátrendeződés következik be és a Schrödinger-egyenletet a hengerszimmetrikus esetre kell megoldani. Az irodalomban csak néhány olyan közlemény jelent meg, amely ezt a valódi két-centrum problémát tárgyalja [27, 28]. A félklasszikus Thomas—Fermi-egyenlet megoldásánál [27] a szelfkonzisztens potenciál



1. ábra. Az atomok közötti kölcsönhatási energia távolságfüggése

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r) + v(r)$$

alakú volt, ahol V_1 , illetve V_2 az izolált ponthibák potenciálja és v a szuperpozíciós potenciál. Az idézett közleményekben még a 2. tartományban is kis kölcsönhatási energiákat kaptak és ez arra bátorította a kutatókat, hogy feltételezzék: a v kis korrekció és a kölcsönhatási energiákat alapvetően az izolált hibák tulajdonságai (árnyékolt potenciáljai) határozzák meg. Ennek megfelelően a gyenge kölcsönhatások elmélete fejlődött elsősorban az utóbbi húsz évben.

A problémát először $v=0$ feltételezéssel, a linearizált Thomas—Fermi-egyenlet megoldásait keresve vizsgálták. Megmutatták, hogy ebben az esetben a klasszikus elektrosztatikai eredmény adódik [29], azaz a két hiba közötti kölcsönhatási energia

$$\Delta E(r) = Z_1 e V_2(r),$$

ahol $Z_1 e$ az egyik hiba többlettöltése, V_2 pedig a másik izolált töltés körül létrejött árnyékolt potenciál

$$V_2(r) = \frac{Z_2 e}{r} \exp \{-qr\},$$

ahol $Z_2 e$ az árnyékolt hiba többlettöltése és q az ismert Thomas—Fermi-féle árnyékolási hossz reciproka. Meg kell említeni azonban, hogy ez az eredmény olyan félklasszikus elméletből adódott, amely a geometrikai optikai közelítésnek felel meg. A félklasszikus, linearizált problémát March és Murray [30] általánosították a hullámelméletre (amely így tartalmazza azt is, hogy az elektronok de Broglie-hullámhossza hogyan befolyásolja a szennyező árnyékolást) és ennek az egyenletnek egy megoldását mutatja a 2. ábra alumíniumban. Látható, hogy az erős csökkenés után oszcillációk lépnek fel (a Friedel-oszcillációk). Az ábrán a nyíl a legközelebbi szomszédos távolságot jelzi és szaggatott vonallal az aszimptotikus tartományban adódó potenciál is felrajzoltuk, ez nyilvánvalóan csak a szennyezőtől nagyobb távolságokban érvényes. Minthogy a diffúziós eredmények becslésekor az aszimptotikus, illetve pre-aszimptotikus potenciálalakok is előfordulnak, ezeknek az analitikus alakját is közöljük itt röviden.

Az oszcilláló potenciálok meghatározására szóráselméleti és soktest-perturbációs módszerek használhatók. Mindkét eljárás az árnyékoló töltéssűrűség által létrehozott potenciáltér aszimptotikus alakjára a

$$V(r) = \frac{\pi}{k_F^2} A \frac{\cos(2k_F r + \delta)}{r^3} \quad (39)$$

kifejezést adja [31, 32, 33], ahol k_F a Fermi-hullámszám. Az A és δ két, a szennyezőre jellemző paraméter, amelyek az idegen atomon szóródott elektronok Fermi-felületnél vett fázistolásaiból $\eta_l(k_F)$ számolhatók ki:

$$A \sin \delta = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l (-1)^l (2l+1) \sin^2 \eta_l(k_F), \quad (40)$$

$$A \cos \delta = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l (-1)^l (2l+1) \sin \eta_l(k_F) \cdot \cos \eta_l(k_F). \quad (41)$$

A fázistolásoknak ugyanakkor ki kell elégíteniük a Friedel-féle összesszabályt

$$\Delta Z = \frac{2}{\pi} \sum_l (2l+1) \eta_l(k_F), \quad (42)$$

amely a potenciálra nézve fontos szelf-konzisztencia feltétel és azt fejezi ki, hogy a szennyező által bevitt többlettöltést a vezetési elektronoknak le kell árnyékolni. (42)-ben ΔZ a szennyező és mátrix vegyértékének különbsége. A szennyezés okozta rácsdeformáció hatását a Blatt-korrektcióval [34] lehet figyelembe venni, amelynek lényege: a szennyező körül a deformáció hatására megváltozik a töltéssűrűség és ezáltal a leárnyékolandó töltés is. Ez a korrekció egy további tagot jelent (42) jobb oldalán, amely arányos a rácsállandó relatív megváltozásával.

A (39) árnyékoló potenciál kiszámításához az A és δ mennyiségekre van szükség. Ezeket rendszerint elvileg két különböző módszerrel szokás megadni. Az elméleti eljárásokban a modellpotenciálon és a Friedel-féle összesszabályon kívül más

menyiséget nem használnak fel [15, 36]. A módszerek másik csoportját az jellemzi, hogy az $\eta_1(k_F)$ mennyiségekkel kapcsolatba hozható, mérhető maradékellenállásból és a Friedel-féle összegszabályból meghatározzák az η_0, η_1 fázistolásokat, a magasabbrendűeket pedig elhanyagolják [32]. Hasonló eljárást használtak [37] és [38]-ban, de itt már a Blatt-korrekciókat is figyelembe vették.

A szennyező közvetlen közelében az aszimptotikus potenciál várhatóan nem ad helyes eredményeket. Itt esetleg a preaszimptotikus alak használható, amely

$$V(r) = \frac{\pi}{k_F^2} \left[A \frac{\cos(2k_F r + \delta)}{r^3} + B \frac{\cos(2k_F r + \xi)}{r^3} + \frac{2A}{k_F} \frac{\sin(2k_F r + \delta)}{r^4} \right] \quad (43)$$

alakú, ahol a B és ξ meghatározásához a fázistolások k -szerinti deriváltjait is ismerni kell k_F -nél [37].

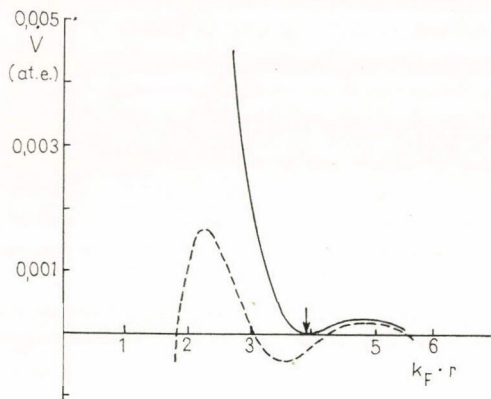
Befejezésül meg kell említeni, hogy a 2. ábrán látható függvény lefutása két-, illetve egyvegyértékű fémekben is hasonló, csupán a legközelebbi szomszédos távolság tolódik egyre inkább balra. Ez azt jelenti, hogy a legközelebbi szomszédos távolságoknál nemesfémekben még a Thomas—Fermi-alak is jó közelítés lehet, míg alumíniumban ilyen távolságoknál már esetleg az aszimptotikus alakok adnak kvalitatíve jobb eredményeket. (A becslésekben általában nem a 2. ábrán folytonos vonallal jelzett egzakt Hartree—Fock-megoldásokat használják fel, mert ezt minden konkrét szennyezőre külön ki kellene számolni. Az aszimptotikus, illetve Thomas—Fermi-potenciálalakokat viszont a vegyérték ismeretében könnyű meghatározni. A Thomas—Fermi-megoldás egyébként az ábrán mutatott esetre a folytonos görbénél kevésbé meredek esésű, a nyílall jelölt helyen egyértelműen pozitív értéket adó görbe.) A SZ—V kölcsönhatás becsléséhez használatos árnyékoló potenciáloknak a diffúziós kísérleti eredményekkel való összevetését a Le Claire-modellben lehet elvégezni. Mint látni fogjuk, ez a modell is tartalmaz olyan feltételezéseket, amelyek realitását vitatni lehet, ezért külön is célszerű összefoglalni az árnyékoló potenciálokra kapott eredmények érvényességét korlátozó tényeket:

(i) Valamennyi megoldás szabadelektron gázba merülő töltések kölcsönhatására érvényes, azaz az eredmények csak olyan fémekben reálisak, ahol a szabadelektron közelítés elfogadható.

(ii) A fenti eredmények csak kis perturbációt jelentő hibák kölcsönhatására és nagy távolságokban érvényesek. Ebből a szempontból a legjobb a helyzet nemesfémekben. Itt a vakancia többlettöltése csak egységnyi és feltehetően a legközelebbi szomszédos távolságnál kisebb távolságokban is jó a Thomas—Fermi-modell. Alumíniumban a vakancia háromszor ekkora perturbációt jelent, továbbá még ha a „gyenge kölcsönhatások” tartományában vagyunk is, nem lehet tudni, hogy a legközelebbi távolságoknál kisebb r -ekre melyik potenciálalak ad jobb leírást.

(iii) Az eddigi megfontolásokban a szennyező speciális elektron szerkezetét nem vettük figyelembe, csak a többlettöltés szerepelt bennük. Átmeneti fém szennyezőkre ez a leírás nem használható. Ekkor például a (39) aszimptotikus alak meghatározásakor (40) és (41)-ben $\eta_0 = \eta_1 = 0$ feltételezést teszik és első közelítésben csak a d elektronok rezonancia járulékát veszik figyelembe [38]. A pontosabb számolásokban lehetőség van természetesen az η_0 és η_1 fázistolások figyelembevételére is [36]. Megemlítjük, hogy átmeneti fém szennyezők alumíniumban való viselkedésének kvalitatív értelmezésére újabban az ionos modellt is használják [39], de ennek részleteire itt nem térhetünk ki.

A diffúziós paraméterek becslésére szolgáló konkrét modellek ismertetése előtt még a SZ—V kölcsönhatási energia kiszámolására használatos két — a fent ismertetett árnyékolt potenciál módszertől eltérő — eljárás érdemel említést. A pszeudopotenciál módszerek közül — amelyek jellegükénél fogva szintén csak a „gyenge



2. ábra. Szennyező körüli árnyékoló potenciál távolságfüggése alumíniumban

kölcsönhatások” tartományában, valamint nem átmeneti fém szennyezők esetén alkalmazhatók — két eljárást célszerű kiemelni [40, 41, 42]. Takai és munkatársai azt tapasztalták [40, 41], hogy számolásaik eredménye azonos nagyságrendű a 2. ábra alapján várható értékekkel és igen érzékeny a pszeudopotenciál és a dielektromos függvény megválasztására. Ho és Benedek [42] a pszeudopotenciál elmélet alapján effektív atomközi potenciálokat konstruáltak különböző szennyezőkre alumíniumban úgy, hogy bennük a szennyező méretét és vegyértékét mint variálható paramétereket kezelték. Munkájukat különösen azért érdemes kiemelni, mert az — az árnyékolt potenciálok kapcsán tárgyalt elektrosztatikus hatásokon kí-

vül — a relaxációs effektusokat is tárgyalja. Lényegében másik csoportba sorolhatók azok a becslési eljárások, amelyek az atomok közötti effektív párpotenciálokra konkrét modellpotenciálokat (pl. Morse-potenciál) vesznek fel és a potenciálparaméterek konkrét ismeretét a szennyező és a mátrix termodinamikai paraméterei (pl. az egy atomra jutó kötési energia vagy az olvadáspont) közötti empirikus vagy félempirikus relációk felállításával kerülik meg [25, 43].

2.3.2. A Le Claire-modell

Tiszta fémekben szennyező-diffúzióra vonatkozó első, kvantitatív értékelésre is alkalmas modellt Lazarus dolgozta ki [29]. ΔH_{vi} -t a szennyező körül kialakuló (Thomas—Fermi-típusú) árnyékoló potenciálnak a vakanciával való elektrosztatikus kölcsönhatásából, a ΔH_{mi} -t pedig a fenti potenciálnak a rács rugalmas tulajdonságaira gyakorolt perturbációiból vezeti le. Hasonló megfontolásokból a D_{0i}/D_0 hányadosra is adott becslést. Ez a modell — amely a korrelációs faktor hőmérsékletfüggését leíró C-t elhanyagolta — csak nemes fémekre szolgáltatott többé-kevésbé elfogadható eredményeket.

Le Claire 1962-ben publikált munkájában ΔH_{mi} -t is közvetlenül elektrosztatikus kölcsönhatásokból vezeti le és a korrelációs effektusokat is figyelembe veszi [16]. (38) első két tagjának becslésénél a többlettöltést leárnyékoló vezetési elektronok által létrehozott Thomas—Fermi-típusú potenciált használva feltételezi, hogy csak legközelebbi szomszédos kölcsönhatások vannak (LSZK). Így

$$\Delta H_{vi} = -ZeV(\mathbf{a}), \quad (44)$$

ahol $-Ze$ a vakancia töltése, \mathbf{a} a legközelebbi szomszédos távolság. A ΔH_{mi}

energiára pedig a

$$\Delta H_{mi} = -2 \left(\frac{Ze}{2} \right) V \left(\frac{11}{16} a \right) - \Delta H_{vi} \quad (45)$$

kifejezést kapta, ahol az első tag a nyeregpon tban levő szennyező atom és a két oldalán levő két „félvakancia” közötti elektrosztatikus kölcsönhatásából származó energia. A korrelációs faktor hőmérsékletfüggését is jellemző

$$C = k \frac{\partial \ln f_j}{\partial (1/T)} \quad (46)$$

(lásd (26)- és (28)-at) mennyiséget a korrelációs faktort leíró [44]

$$f_i = \frac{\omega_1 + 7/2 \omega_3}{\omega_1 + \omega_2 + 7/2 \omega_3} \quad (47)$$

összefüggésből kiindulva becsülte meg. Itt ω_2 a szennyező—vakancia (SZ—V), ω_1 a szennyezővel szomszédos mátrix atom és vakancia helycsere, ω_3 a szennyezővel szomszédos vakancia és a szennyezővel nem szomszédos mátrix atom helycseréjének frekvenciája. Le Claire megmutatta, hogy ezeket a frekvenciákat az

$$\omega = \nu \exp \left(\frac{S_m}{k} \right) \exp \left(- \frac{H_m}{kT} \right) \quad (48)$$

alakba írhatjuk. Ha (47)-ben a számlálót és a nevezőt elosztjuk ω_0 -al (ez a frekvenciája az M—V helycserének a tiszta mátrixban) és feltételezzük, hogy $\nu_1 = \nu_3 = \nu_0$, valamint $S_{m1} = S_{m3} = S_m$, akkor

$$f_i = \frac{\exp \left(- \frac{\Delta H_1}{kT} \right) + 7/2 \exp \left(- \frac{\overline{H\Delta}_3}{kT} \right)}{\exp \left(- \frac{\Delta H_1}{kT} \right) + \frac{\nu_{0i}}{\nu_0} \exp \left(- \frac{\Delta H_{mi}}{kT} \right) + 7/2 \exp \left(- \frac{\overline{H\Delta}_3}{kT} \right)} \quad (49)$$

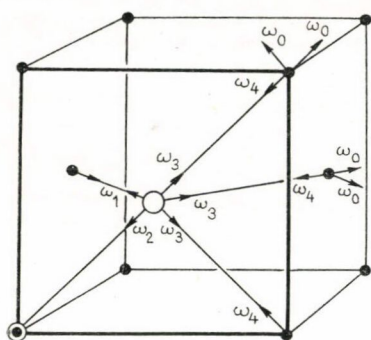
A $\overline{H\Delta}_3$ jelölés azt jelzi, hogy geometriailag hétféle ilyen ugrás létezik és ezek aktívációs energiáinak súlyozott átlagát vesszük (3. ábra). A $\overline{H\Delta}_3$ számolásakor hasonlóan kell eljárni, mint ΔH_{mi} esetén, csak most természetesen az árnyékoló potenciál értékét más helyen kell kiszámítani. Le Claire a C becslésénél a (49) nevezőjében szereplő középső tagban a $\frac{\nu_{0i}}{\nu_0} \exp \left(\frac{\Delta S_{mi}}{k} \right)$ mennyiséget a D_{0i}/D_0 kísérleti adatokból határozza meg (ezzel módszerét félempirikussá teszi) és C -re a

$$C = \frac{D_{0i}}{D_0} f_0 \exp \left(\frac{C}{kT} \right) \times \quad (50)$$

$$\times \left\{ \frac{(\Delta H_{mi} - \Delta H_1) \exp \left\{ - \frac{\Delta H_{mi} + \Delta H_1}{kT} \right\} + 7/2 (\Delta H_{mi} - \overline{H\Delta}_3) \exp \left(- \frac{\Delta H_{mi} + \overline{H\Delta}_3}{kT} \right)}{\left[\exp \left(- \frac{\Delta H_1}{kT} \right) + 7/2 \exp \left(- \frac{\overline{H\Delta}_3}{kT} \right) \right]^2} \right\}$$

kifejezés adódik.

A szennyező-diffúziós eredményeknek a Le Claire-modellen alapuló értelmezéséről összefoglalva a következőket állapíthatjuk meg. Nemesfémekben a Thomas—Fermi-árnyékolás alkalmazása jó egyezésre vezetett a kísérleti adatokkal [16], alu-



● szennyező

○ vakancia

• Matrix atom

3. ábra. Szennyezés melletti vakanciaugrások és a megfelelő ugrási frekvenciák

zművek — a rezonancia szórás feltételezéséből származtak [38], illetve a Kohn—Voskó-féle [32] félempirikus módszerrel [50]-ben és [51]-ben — a Blatt-korrektúra figyelembevételével — néhány nem átmeneti fém szennyezőre (Ag, Ge, Zn, Cu, Mg) meghatározott értékek voltak. Ez utóbbi két számolás eredményei meglepően jól egyeztek a kísérleti adatokkal, de — mint azt az 5. fejezetben látni fogjuk — ez véletlen volt. Ugyanis az aszimptotikus alak használata a legközelebbi szomszédos hely környezetében durva közelítésnek tűnik, átmeneti fém szennyezőkre pedig csak a d elektronok járulékaival számoltak. Továbbá az A és δ paraméterek szemiempirikus meghatározása nem egyértelmű megoldásokat ad és közülük csak a kísérlettel való egyezés alapján lehet választani.

Újabbban megjelent néhány olyan publikáció is, amelyben a nyeregponti helyzet energiáját (tehát nem csak a SZ—V kölcsönhatási energiát) is pseudopotenciál módszerrel becsülték meg [52, 53, 54]. [53]-ban csak ΔH_{mi} -t számolták és azt kapták, hogy ez arányos a vegyértékkel és a diffundáló ion méretére jellemző iontörzs sugárral. Ez az eredmény kvalitatíve értelmezi azt az [55]-ben megállapított empirikus szabályt, hogy a periódusos rendszer egy sorában balról jobbra, illetve felülről lefelé haladva a szennyező-diffúziós együttható értéke szisztematikusan változik. [52]-ben ΔQ értékét számolták ki Mg, Zn és Cd diffúziójára alumíniumban és a kísérleti adatokkal egyező előjelű és azonos nagyságrendű eredményeket kaptak.

Megemlítjük még azokat a próbálkozásokat, amelyek D_i értelmezésénél első sorban a mérhető hatásokat veszik figyelembe és a makroszkopikus rugalmas elmélet alapján számolnak [56, 57]. Olyan kvalitatív következtetésre jutnak, hogy a rács tágu-

míniumban azonban még előjelben is helytelen eredmények adódtak [45]. Ez megfelel a 2.3.1. fejezetben vázolt fizikai képnek: a vegyérték növekedésével az elektronok hullámhossza csökken, a geometriai optikai közelítés elromlik, az oszcillációk már a legközelebbi szomszédos hely környezetében megjelennek. Ennek megfelelően több munkában is (39)-hez hasonló aszimptotikus potenciál alakokat próbáltak meg felhasználni a Le Claire-modellben [45, ..., 49], hogy értelmezzék a szennyező-diffúziós adatokat alumíniumban. Peterson és Rothman [45] azt kapták, hogy a Friedel-féle aszimptotikus alak ((39)-ben $A \approx \Delta Ze$) feltételezve, hogy $\delta \approx 0$, helytelen eredményekre vezet. Hasonló következtetésre jutottak [46]-ban is, bár itt nem tételezték fel, hogy $\delta \approx 0$. Edelglass és Ohring [47] a kísérlettel egyező eredményeket kaptak ugyan, de ezt a Le Claire-modell önkényes — fizikailag nem indokolható — módosítása árán érték el. Hood és Schultz [48], valamint Anand és Agarwala [49] számolásaikban olyan A és δ mennyiségeket használtak, amelyek — átmeneti fém szennye-

lását okozó szennyezők Q_i -ben csökkenést, D_{0i} -ben pedig növekedést okoznak. Sajnos ez az egyszerű szabály nem teljesül általánosan és ezért ezek a modellek nem váltak igazán elterjedteké a diffúziós irodalomban sem.

Végül a termodinamikai paramétereket felhasználó eljárások közül [25, 43], a kvantitatív Neumann—Hirschwald-modellt említjük meg. Ennek részleteit most nem ismertetjük, a 6. fejezetben visszatérünk rá. A módszer a Le Claire-modellben szereplő energiák, valamint a tiszta szennyező és tiszta mátrixfém olvadáspontjának hányadosa között állapít meg arányosságokat, és C értékét a *Le Claire* által adott eljárás szerint becsüli meg. Az arányossági faktorokat a szennyező körüli nyolc héj relaxált kölcsönhatásaiból határozzák meg Morse-potenciálok segítségével, és a kapott eredmények jól egyeztek a kísérleti adatokkal rézben, aranyban és ezüstben.

2.3.3. Híg ötvözetek

A (32)-ben szereplő b együttható becslésére szolgáló első kvalitatív, de a fizikai lényegét szemléletesen tartalmazó modell *Hoffmann és társaitól* származik [58]. Feltételezik, hogy a szennyezőt „hatástartomány” veszi körül (ez konkrét számolásaikban csak az első koordinációs héjat jelenti), amelyben ΔH_{vi} , ω_1 , ω_3 és az ezzel ellentétes ugrás frekvenciája ω_4 is más lehet mint a szennyezőtől távol, ahol a mátrixvakancia kicserélődési frekvencia ω_0 (lásd 3. ábrát). Ha egy mátrix vagy egy ötvöző atom bolyongása során ilyen „hatástartományba” jut, megváltozik a diffúziós együttható értéke és ez a koncentrációval arányos változást eredményez. A modell fenti megfogalmazása szemléletes és csaknem valamennyi pontosabb elmélet is ebből indul ki, figyelembe véve még azt is, hogy a szennyező környezetében a korrelációs faktor értéke is megváltozhat.

Lidiard [59] a b együttható levezetéséhez először statisztikus termodinamikai módszerrel meghatározta az egyensúlyi vakanciakoncentrációt, azaz a szabad és a szennyezőkhöz kötött vakanciák relatív számát. Csak legközelebbi szomszédos kölcsönhatásokat (LSZK) vett figyelembe és például a szabad vakanciák egyensúlyi koncentrációjára a jól ismert Lomer-formulát kapta (lásd pl. [60]). Ezután c_{01} -ben csak elsőrendű tagokat figyelembe véve meghatározta a mátrix atomok ugrásainak teljes számát a szennyező környezetében. Ennek segítségével kiszámolta a mátrix atom átlagos ugrási frekvenciáját és ebből azzal a feltételezéssel, hogy a szennyező környezetében az ugrási frekvenciák nem változnak lényegesen (azaz a korrelációs faktor ugyanaz, mint tiszta fémekben) b -re analitikus összefüggést kapott. Később *Howard és Manning* [61] megmutatta, hogy ha elhagyjuk ezt az utóbbi feltételezést, akkor

$$b = -18 + \left(4 \frac{\omega_1 f_1}{\omega_0 f_0} + 14 \frac{\omega_3 f_2}{\omega_0 f_0} \right) \exp \left(- \frac{\Delta g_{vi}}{kT} \right), \quad (51)$$

ahol f_1 és f_2 átlagos korrelációs tényezők, amelyek az ω_3/ω_0 , ω_2/ω_1 , ω_1/ω_3 hányadosok, valamint $\exp(-\Delta g_{vi}/kT)$ függvényei. Ha $f_1=f_2=f_0$, akkor a *Lidiard* által eredetileg kapott képlethez jutunk. Δg_{vi} a szennyező atomnak a vele szomszédos vakanciával való kölcsönhatási Gibbs-szabadentalpiája. Ha Δg_{vi} -ben a képződési entrópia elhanyagolható [16] $\Delta g_{vi} = \Delta H_{vi} = -B_{vi}$, ahol B_{vi} a SZ—V kötési energia. Könnyen megmutatható, hogy *Lidiard*-közelítésben b -t a $D_{A^*}(0)$ és $D_{B^*}(0)$

hányadosa segítségével ki lehet fejezni [21]

$$b = -18 + \frac{4f_0}{1-f_i} \cdot \frac{D_{B^*}(0)}{D_{A^*}(0)}. \quad (52)$$

Az (51), illetve az (52) formulák alapján b becslésére például a *Le Claire* által adott módon van lehetőség: a frekvenciahányadosokat a $v_1=v_0=v_3$ feltételezéssel (lásd (48)-at) a 2.3.2. fejezetben leírt módon számolják és általában feltételezik azt is, hogy $f_1=f_2=f_0$. Ilyen számolásokból — az árnyékoló potenciálra Thomas—Fermi-alakot használva — a kísérletekkel elfogadhatóan egyező eredményeket kaptak például ezüst alapú ötvözetekben [16].

A b' együttható (33)-ban a szennyező ugrási frekvenciáknak a két szennyező-vakancia komplexben történő megváltozásaiból ered. Ennek becslésére — még durvább egyszerűsítéseket használva is — a 3. ábrán mutatott frekvenciákon kívül legalább hat újabb frekvencia lenne szükséges [62]. Ilyenkor a vakancia koncentrációra vonatkozó számolást is magasabb rendig kell elvégezni [20]. Analitikus formulát erre az esetre csak igen komplikált alakban lehet felírni és ezzel kapcsolatban itt csak az idézett irodalmakra utalunk, azzal a megjegyzéssel, hogy híg ötvözetekben az (51), illetve (52) formulák is jól használhatók és a fenti korrekciók csak nagyobb c_{01} koncentrációknál szükségesek.

Mielőtt a szennyező-diffúziós együttható koncentráció függésével foglalkoznánk, megemlítünk egy a fenti eljárástól eltérő modellt. *Santoro* [63] a szennyezők körüli árnyékoló potenciál oszcilláló alakjából kiindulva nem csak szomszéd-kölcsönhatásokat vesz figyelembe, hanem éppen a hosszabb távú kölcsönhatásokra koncentrálna és a szennyező közvetlen környezetében kevésbé precíz. Feltételezi, hogy a szennyezőtől r_j távolságban a mátrix—vakancia-helycsere frekvenciája egy $\exp[-\Delta Q(r_j)/kT]$ faktorról változik meg, ahol

$$\Delta Q(r_j) = \Delta H_m(r_j) + \Delta H_v(r_j). \quad (53)$$

Feltételezve, hogy a vakancia képződési energiában bekövetkező változás a vakanciának az ugrás előtti és utáni helyén ugyanakkora

$$\Delta Q(r_j) = -Z_v eV(r_j), \quad (54)$$

ahol $-Z_v e$ a vakancia többlettöltése. A mátrix—vakancia-ugrások számában bekövetkező átlagos relatív változás tehát

$$\frac{D_{A^*}(c_{01}) - D_{A^*}(0)}{D_{A^*}(0)} = \frac{c_{01}}{6} \sum_j n_j \left[\exp\left(-\frac{\Delta Q(r_j)}{kT}\right) - 1 \right], \quad (55)$$

ahol n_j az r_j távolságban levő nyeregponthelyek száma és az $1/6$ -os faktor azért lép fel, mert az összes ugrások száma $l k k$ kristályban $6N$, ha a kristály N atomból áll. Az $[\exp(-\Delta Q(r_j)/kT)]$ faktort sorbafektve, (54) segítségével kapjuk

$$b = \frac{Z_v e}{6kT} \sum_j n_j V(r_j). \quad (56)$$

Santoro konkrét számolásaiiban a (39)-hez hasonló alakú potenciált használt ($\delta=0$ feltételezéssel) és eredményei közel egy fél nagyságrenddel kisebbek voltak mint

a kísérleti értékek cink ötvözetekben. *Alexander* és *Slifkin* [55] alumíniumban végzett hasonló számolásokat és meglepően jó egyezést kapott az addig ismert kísérleti adatokkal. Az (56)-ban szereplő összegzést harminc koordinációs héjig végezték és azt kapták, hogy például egy atomszázalék kétvegyértékű szennyező esetén az öndiffúziós együtthatóban 10%-os növekedés várható. Az általuk használt formulából azonban lemaradt az 1/6-os szorzófaktor, így eredményeiket még ezzel korrigálni kell.

A szennyező-diffúziós együttható koncentráció függésének levezetéséhez a 3. ábrán mutatott frekvenciákon kívül még legalább három újabb ugrási frekvenciát kell bevezetni [21]. A b_i -re vonatkozó analitikus kifejezés megszületésére egészen a legutóbbi időig kellett várni: *Miller* [19] adott meg először nagyon leegyszerűsített képletet, amelyet *Warburton* [20] később korrigált. *Bocquet* [62] 1973-ban vezetett le realisabb közelítésből származó analitikus formulát, amelyet pedig *Le Claire* helyesbített 1976-ban [21]. Megjegyezzük, hogy *Le Claire* levezetésének részleteit még ezidáig sem publikálta. A történeti fejlődés bemutatása helyett itt *Le Claire* formuláját adjuk meg és csak utalni fogunk a korábbi eredményekre. Az említett modellben tehát a következő három új frekvenciát vezetik be: ω_{i1} , amely olyan szennyező ugráshoz tartozik, amikor a két szennyező—vakancia-hármas csak átorientálódik, ω_{i4} a két egymással eredetileg szomszédos szennyező disszociációs ugrását és ω_{i3} pedig az eredetileg egymással nem, de ugyanazzal a vakanciával szomszédos szennyezőknek egy asszociatív ugrását jellemzi. Ha a szennyezők közötti kölcsönhatás nem zérus (a kölcsönhatási energia legyen $\Delta g_{ii} = \Delta H_{ii} = -B_{ii}$), belátható, hogy

$$\omega_{i4} \exp\left(-\frac{\Delta H_{ii}}{kT}\right) = \omega_{i3} \exp\left(-\frac{\Delta H_{vi}}{kT}\right). \quad (57)$$

Ezek után elvileg hasonlóan járva el mint ahogy b levezetésekor *Lidiard* tette és feltételezve, hogy a korrelációs faktorok változása elhanyagolható [21]

$$b_i = -6 - 12 \exp\left(-\frac{\Delta H_{ii}}{kT}\right) + \left[4 \frac{\omega_{i1}}{\omega_2} \exp\left(-\frac{\Delta H_{ii}}{kT}\right) + 14 \frac{\omega_{i3}}{\omega_2}\right] \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_{vi}}{kT}\right) \quad (58)$$

lkk kristályokban. (58) *Bocquet* eredményétől az (57) összefüggés felhasználása és a szennyező-vakancia párok egyensúlyi számára vonatkozó képlet korrekciója miatt különbözik. Ennek a korrekciónak az a lényege, hogy a diffundáló tracer is olyan ötvözőnek kell tekinteni, amely termikus egyensúlyban van a ráccsal. Ha ezt a feltételt nem alkalmazzuk (azaz a bolyongást végző tracer atomra ezt a termodinamikai egyensúlyi feltételt nem követeljük meg), akkor (58) első két tagja helyett -18 -at kapunk [64]. Ha (58)-ban $\Delta H_{ii} = 0$ és $\omega_{i1} = \omega_{i3} = \omega_2$, akkor

$$b_i = 18 \left[\exp\left(-\frac{\Delta H_{vi}}{kT}\right) - 1 \right], \quad (59)$$

amely egy numerikus faktortól eltekintve megegyezik *Miller* [19], illetve *Warburton* [20] által korábban levezetett formulákkal. Az (59) alapján végzett elméleti számítások [21] jó egyezést adtak a kísérleti adatokkal ezüst alapú ötvözetekben, míg alumínium ötvözetekre tudomásunk szerint eddig ilyen számításokat nem végeztek.

Érdemes megemlíteni, hogy ugyanolyan közelítésben, ahogyan (58)-ból (59)-et kaptuk, (51)-ből is az (59) adódik, azaz a szennyező által okozott kis perturbációk esetén ($\Delta H_{ii} \sim 0$ és a frekvenciahányadosok értéke közel egy) a szennyező-diffúziós és az öndiffúziós gyorsítási faktorok értéke azonos, azt csak a SZ—V-kötési energia határozza meg.

A fent ismertetett próbálkozásokon kívül érdemes még megemlíteni Stark [65, 66] munkáit is, aki ugyan nem adott analitikus formulát b_i -re, de ennek három paramétertől ($X = \exp(\Delta H_{ii}/kT)$, $Y = \exp(\Delta H_{vi}/kT)$ és $Z = \omega_{i1}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$) való függését vizsgálta és táblázatokban adta meg eredményeit. Számításainak — bonyolultságuk ellenére — egyik legnagyobb érdeme, hogy megmutatta; a korrelációs faktorok valóban nem változnak erősen a 2 SZ—V-hármasban és így az (58) becslés realitásnak tekinthető.

Befejezésül két megjegyzést érdemes még tenni. Itt nem foglalkoztunk azokkal az eljárásokkal, amelyek a diffúziós együtthatók koncentráció függésének leírására a (35) szabály általánosításával próbálkoznak [67, 68]. Ezekre a módszerekre és kritikájukra a 6. fejezetben visszatérünk. A tisztán mérhetősekből kiinduló eljárások (lásd pl. [57]) — a szennyező diffúziós együttható tiszta fémekben történő becsléséhez hasonlóan — viszonylag egyszerű szabályokat állapítanak meg, amelyeket azonban a kísérleti eredmények nem igazoltak (lásd pl. [63]).

3. KÍSÉRLETI ELŐZMÉNYEK

3.1. Cink diffúziója tiszta alumíniumban

Az eddig ismeretes eredményeket foglalja magába időrendi sorrendben az 1. táblázat, amelyben a mérési technikára vonatkozó utalásokat is feltüntettük. Az utolsó négy adat csaknem hibahatáron belül egyezik és csak egyetlen igazán kiugró értéket közöltek [72]. Ennek oka feltehetően az, hogy csak igen szűk intervallumban (620—700 K), néhány hőmérsékleten végeztek méréseket, s az Arrhenius-egyenest is jóval nagyobb a pontok szórása, mint a többi esetben. A táblázatban szereplő adatok közül az irodalomban a legmegbízhatóbbnak Peterson és Rothmann [45]

1. TÁBLÁZAT

Zn diffúziós adatai alumíniumban az irodalom szerint

Q (eV)	D_0 (cm ² /s)	Módszer	Hivatkozás
1,209 ± 0,02	11,57	szendvics, spektrálanalízis	[69]
1,34 ± 0,03	1,1 ± 0,04	tracer, szeletelés	[70]
1,32 ± 0,02	0,9 ± 0,3	ellenállás mérése	[71]
1,70 ± 0,13	400	tracer, szeletelés	[72]
1,255 ± 0,006	0,259	tracer, egykrist., szeletelés	[45]
1,201 ± 0,009	0,30	tracer, szeletelés	[73]
1,25 ± 0,02	0,20 ± 0,08	szendvics, mikroszonda	[74]
	— 0,06		
1,222 ± 0,013	0,177 ± 0,047	tracer, maradék aktivitás	[75]
	— 0,037		

eredményét tartják az igen precíz technikai megvalósítás és az egykristályok alkalmazása miatt. A [75] közleményt pedig azért érdemes kiemelni, mert ebben igen széles hőmérséklettartományban mértek és még így sem tapasztaltak eltérést az Arrhenius-típusú hőmérsékletfüggéstől.

3.2. Diffúzió híg alumínium ötvözetekben

Tracer technikával végzett olyan mérés, amely cink diffúziójára híg alumínium ötvözetekben is szolgáltatott eredményeket, eddig csak négy ismeretes (2. táblázat). Ezekben a munkákban azonban nem vizsgálták rendszeresen és részletesen a szennyező-diffúziós együttható koncentráció- és hőmérsékletfüggését. A 2. táblázatban

2. TÁBLÁZAT

Zn diffúziós adatai híg alumínium ötvözetekben az irodalom szerint

c_{Zn} (at %)	c_{Mg} (at %)	Q (eV)	D_0 (m ² /s)	Hivatkozás
0,4	—	$1,248 \pm 0,022$	0,25	[73]
4,85	—	1,52	—	[72]
4,33	—	$1,23 \pm 0,03$	$0,35 \pm 0,16$	[70]
2,36	2,22	$1,291 \pm 0,013$	$0,682 \pm 0,017$	[75]

szereplő második [72] kísérleti eredményre ugyanazok a kritikai megjegyzések érvényesek, mint az előző pontban. Megemlítjük, hogy *Fujikawa* és *Hirano* [75] eredményei az e dolgozat témaköréből készült idegennyelvű közleményeinkkel csaknem egyidőben [76, 77] jelentek meg.

A kísérleti előzmények között érdemes röviden kitérni olyan mérésekre is, amelyek a cink atom mint izolált szennyező hatásáról szolgáltatnak információkat, illetve amelyekben az ön- és a szennyező diffúziós együttható koncentrációfüggését vizsgálták más alumínium ötvözetekben.

Elsősorban *T. R. Anthony* dolgozta ki azt a kísérleti technikát [78, 79], amelynek segítségével meg lehetett határozni a szennyező környezetében lejátszódó ugrási frekvenciák közül (lásd 3. ábra) az ω_3/ω_1 hányados értékét. Az eljárásnak az a lényege, hogy a híg ötvözet igen gyors lehűtése (edzése) után a vakancia nyelők felé folyó vakancia árammal szemben áramló atomok között — a fent említett frekvencia hányadostól függően — a mátrix és az ötvöző atomok aránya nem lesz ugyanaz, mint az egyensúlyi ötvözetben, és így szennyező dúsulás vagy elszegényedés jön létre a vakancia nyelő környékén. *Anthony* azt kapta [79], hogy Zn-re $\omega_3/\omega_1 < 0,26$ és dúsulás jön létre, Cu-re $\omega_3/\omega_1 = 0,30$ (nincs sem dúsulás, sem elszegényedés) és Ge-ra $\omega_3/\omega_1 > 0,18$ (elszegényedés), míg AlMg ötvözetekben dúsulást figyeltek meg, de kvantitatív kiértékelést nem végeztek.

Izotóp effektus méréseket ezüst diffúziójára 1975-ben publikáltak [80], majd 1978-ban *Peterson* és *Rothmann* [81] közöltek hasonló méréseket cink és réz diffúziójára tiszta alumíniumban. Mindkét közleményben arra a következtetésre jutnak, hogy az eredményekből a divakancia járulék szerepére nem lehet kvalitatíve sem következtetni. Ugyanakkor a korrelációs faktor hőmérsékletfüggését jellemző

C mennyiség (lásd (28)-at) kicsi, ezért érthető, hogy a szennyező-diffúziós adatok széles hőmérséklettartományban követik az Arrhenius-törvényt.

A szennyező—vakancia-kölcsönhatási energia meghatározására szolgáló módszerek közül a termikus egyensúlyi technikát, E , (amely a rácsállandó és a makroszkopikus hosszváltozás egyidejű mérésén alapul), a pozitron annihilációs módszereket, PA , a leedzési és kitemperálási kísérleteket, Q , érdemes megemlíteni [82]. Mind-egyik eljárásnak vannak előnyei és hátrányai. Az egyensúlyi módszerek elvileg a leg-tisztábbak, de kis $SZ—V$ kötési energiákat csak nagyon pontatlanul lehet segítségükkel meghatározni. A pozitron annihiláció érzékeny módszer, de a mérési eredmények kiértékelése viszonylag bonyolult. A befagyasztási és kitemperálási kísérleteknél pedig a több szennyezőből és vakanciából álló komplexek képződése okozhat zavart. Ennek tulajdonítják, hogy korábban lényegesen nagyobb kötési energiákat határoztak meg ilyen mérésekből mint az utóbbi időkben [83]. Minthogy azonban ezeknek a kísérleteknek a technikai megvalósítása viszonylag egyszerű, az alumínium alapú ötvözetek (és elsősorban az $AlZn$, $AlZnMg$ ötvözetek) vizsgálatának egyik kiterjedt területét alkotják a zónaképződési, kiválási folyamatok ellenállás mérésével való követését alkalmazó eljárások (lásd pl. [84, ..., 86]). Ezeknek a módszereknek általános jellemzője, hogy a minta leedzése után nemegyensúlyi körülmények között lejátszódó folyamatok vizsgálatából próbálnak információt szerezni az egyensúlyi körülmények között fennálló $SZ—V$ kötési energiára és a vakanciák, valamint a szennyező atomok migrációs energiáira. Éppen ezért inkább e mérések kiértékelésekor tett különböző feltételezések realitását lehet eldönteni az egyensúlyi körülmények között mért értékekkel való összehasonlításból és nem megfordítva [87]. A 3. táblázat tartalmaz néhány nemátmeneti fém szennyezőre vonatkozó kísérleti adatot B_{vi} -re. Az irodalomban jelenleg leginkább elfogadott eredményeket és olyan szennyezőket igyekeztünk kiválasztani, amelyekre különböző kísérleti módszerekkel is meghatározták a $SZ—V$ kötési energia értékét.

A diffúziós paraméterek koncentrációfüggését alumínium ötvözetben eddig

3. TÁBLÁZAT

Szennyezés—vakancia kötési energia
alumíniumban nem átmeneti fémekre

Szennyező	B_{vi} (eV)	Módszer*	Hivatkozás
Mg	0,01	E	[88]
Mg	$0,04 \pm 0,01$	Q	[83]
Ag	0,08	E	[89]
Ag	0,01	Q	[83]
Si	0,03	E	[90]
Si	$0,07 \pm 0,01$	Q	[83]
Cu	0,00	E	[91]
Zn	$0,019 \pm 0,004$	PA	[92]
Zn	$0,020 \pm 0,01$	Q	[83]
Zn	0,05	Q	[85]

* A betűk jelentése:

E — hossz és rácsállandó mérése egyensúlyban,

Q — edzés (quench),

PA — pozitron annihiláció.

kevesen vizsgálták. *S. N. Sing* [93] két hőmérsékleten megadja a diffúziós együttható értékét egy-két koncentrációnál AlCu és AlMg ötvözetekben. Ezekből az adatokból — a viszonylag nagy hibák miatt — nem lenne reális kiszámolni b_i értékét. A koncentrációfüggés meghatározása szempontjából hasonló a helyzet a [94, ..., 98]-ban kapott eredményekkel is, ahol a szemcsehatárok mentén kialakuló kiválás-mentes zónák növekedéséből határozták meg a diffúziós együtthatókat és az aktivációs energiákat AlAg , AlMg , AlCu és AlZnMg ötvözetekben.

Eddig két közleményben publikáltak tracer diffúziós méréseket, amelyben ^{64}Cu és ^{110}Ag diffúziós együtthatójának koncentrációfüggését vizsgálták híg alumínium ötvözetekben [55, 99]. Heumann és Böhmer [99] ^{110}Ag diffúziós együtthatóját határozták meg AlAg ötvözetekben és azt kapták, hogy az gyakorlatilag független a koncentrációtól ($b_i \approx 0$). [55]-ben ^{64}Cu és ^{110}Ag diffúziós együtthatóját mérték néhány hőmérsékleten 1 at% szennyező tartalomnál, és kaptak néhány tájékoztató eredményt b_i értékére AlZn , AlCu és AlAg ötvözetekben.

Végül megemlítjük, hogy az öndiffúziós együttható koncentrációfüggését az alkalmas alumínium tracer hiánya miatt eddig közvetlen módszerrel nem vizsgálták. Jelenleg két eljárás ismeretes, amelyből következtetni lehet b értékére. Az NMR mérések [100, 101] sajnos, inkább az aktivációs energiák, mint az együtthatók koncentrációfüggésének meghatározására alkalmasak és a kapott eredményeknek a tracer módszerből származó értékekkel való összevetését nehezíti, hogy ez a módszer lokális, míg a hagyományos mérés a tracer pályájára átlagolt információt szolgáltat. A másik eljárásnál az anyagban leedzés után 320–360 K intervallumban történő kitemperálással diszlokáció hurkokat hoznak létre, majd ezeknek a 420–520 K intervallumban történő összehúzódnását vizsgálják ellenállásméréssel [84] vagy elektronmikroszkóppal [102]. [84]-ben megmutatták, hogy tiszta alumíniumban a folyamat aktivációs energiája lényegében egyenlő az öndiffúziós energiával. [102]-ben ezt a jelenséget AlZn és AlSi ötvözetekben is vizsgálták, és megállapították, hogy b értéke a hőmérséklet növelésével csökken, az aktivációs energiák pedig alig térnek el egymástól. Az NMR technikával és a diszlokációgyűrűk összehúzódnásából kapott eredmények — még azonos technika esetén is — erősen eltérnek (lásd pl. [100] és [101]), és nem alkalmasak arra, hogy b -re megbízható következtetést lehessen belőlük levonni. Az idézett munkák alapján [102]-ben megkísérelnek — talán kicsit önkényes válogatással — olyan sorrendet felállítani, amely megadja, hogy melyik szennyező hat erősebben az öndiffúzióra. Eszerint valamennyi vizsgált ötvözetre b értéke 0 és 10 közé esik 773 K-on és a hatás a Zn-től a Mg-on és Si-on keresztül a Cu-ig haladva növekszik.

II. KÍSÉRLETI TECHNIKA, EREDMÉNYEK

4. A MÉRÉSEK ISMERTETÉSE, KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK

Az első fejezetben már utaltunk rá, hogy — az elmélettel való egyértelmű összevethetőség miatt — kísérleti szempontból igen nagy jelentősége van a tracer diffúziós együtthatók meghatározásának. Az ilyen típusú mérési eljárás lényege a következő: vékony felületi réteg formájában radioaktív atomokból álló forrást viszünk fel a minta felületére és adott hőmérsékleten meghatározott ideig tartó hőkezelés után megállapítjuk a tracereloszlást a minta szeletelésének segítségével. Ha a felvitt

réteg pillanatforrásként működik a (14) egyenlet megoldásaként a tracer atomok koncentrációjára a

$$c_i(z, t) = \frac{M_i(0, 0)}{\sqrt{\pi Dt}} \exp \{-z^2/4tDt\} \quad (60)$$

adódik (lásd pl. [5]), ahol z a felülettől mért távolság a henger tengelyével párhuzamosan, $M_i(0, 0)$ pedig a $t=0$ pillanatban a $z=0$ helyen a felületegységre jutó anyagmennyiség. Tehát a szeletek fajlagos aktivitásának a logaritmusát a behatolási mélység függvényében ábrázolva (felvéve a behatolási függvényt) egyenest kapunk, amelynek meredekségéből a diffúziós együttható értékét kiszámolhatjuk.

A következőkben a végzett mérések egyes fázisainak technikai részleteit ismertetjük, majd elemezzük a lehetséges hibákat, és — ahol szükséges — elvégezzük a megfelelő korrekciókat. Végül táblázatokban összefoglalva megadjuk a kapott eredményeket, és néhány ábra segítségével is illusztráljuk a diffúziós együtthatók koncentrációtól és hőmérséklettől való függését.

4.1. A próbatetek előkészítése, felületi kezelése

Méréseinkhez az ALUTERV—FKI által 99,995% tisztaságú alapanyagokból előállított AlZn , AlMg , AlCu , AlSi , AlY , AlZnMg , AlZnFe , AlZnCu , AlZnSi és AlZnY ötvözeteket használtunk. A mintákat öntéssel állították elő, majd kovácsolással az átmérőt 50%-kal csökkentették. A próbatetek végső alakját (0,8—1,0 cm hosszú és 0,6 cm átmérőjű henger) esztergálással alakítottuk ki.

A szemcsehatár-diffúziós járulékok elkerülése céljából a szemcseszerkezet növelését és stabilizálását szolgáló hőkezeléseket hajtottunk végre. A próbateteket a szolidusz hőmérséklet alatt néhány fokkal az összetételtől függően, 10 órától néhány napig terjedő ideig tartottuk és végeredményben olyan nagyszemcsés szerkezetet kaptunk, amelyben az átlagos szemcseméret 0,1 cm-nél nagyobb volt. Azt tapasztaltuk, hogy a vasat tartalmazó ötvözetekben a szemcsenövekedés csak nagyon nehezen ment végbe és a 2,13 at% Zn, 0,10 at% Fe összetételű mintán nem is sikerült diffúziós szempontból elfogadható szemcseméretet produkálni. Kisebb mértékben, de hasonló tapasztalataink voltak az ittriumot és rezet tartalmazó ötvözetekkel is.

A minták ötvöző tartalmát az ALUTERV—FKI-ban kémiai analízissel állapították meg. Később látni fogjuk, hogy a szeletelést legnagyobbbrészt olyan eljárással végeztük, amelynél a minta sűrűségének ismeretében a szelet tömegéből lehet kiszámolni a szeletvastagságot. Ezért megmértük a sűrűségeket is a szokásos — Archimedes-elven alapuló — módszerrel, az eredményeket korrigáltuk a levegő felhajtóerejére [103]. Az egyes összetételeknél általában öt-hat próbatesten mértünk és az eredmények — néhány esettől eltekintve — a kísérleti hibán belül megegyeztek. A kiugró értékek mindig kisebb sűrűségek voltak, amelyeket a mintákba a megmunkálás során került üregek okozhattak. Ezeket az értékeket az átlagok kiszámolásakor nem vettük figyelembe. A sűrűségek ismeretében kiszámoltuk a koncentrációkat és a kapott eredmények jól egyeztek a kémiai analízisből meghatározott értékekkel [104] (az eltérés kisebb volt mint 20%). A későbbiekben — azoknak az ötvözőknek a kivételével (Fe, Si, Y), amelyekre a sűrűségekből a szennyező tartalmat vagy a kis szennyező mennyiségek vagy a kis sűrűségkülönbségek miatt nem lehetett kiszámítani — a sűrűségmérés alapján kapott értékeket használjuk (4. táblázat).

4. TÁBLÁZAT

A dolgozatban vizsgált minták összetétele

Minta jele	Zn (at %)	
	névleges	sűrűségmérésből
A1	0	0
BAZ—1	1,0	1,16
BAZ—2	1,5	1,73
BAZ—3	2,1	2,15
BAZ—4	2,59	2,80
BAZ—5	3,10	3,29
BAZ—6	3,70	3,76

Minta jele	Mg (at %)	Zn (at %)
MZ—10	1,11	0
MZ—12	1,12	0,71
MZ—13	1,13	1,49
MZ—15	1,14	2,11
MZ—20	2,77	0
MZ—22	2,80	0,71
MZ—23	2,83	1,48
MZ—25	2,86	2,11
MZ—40	4,43	0
MZ—60	6,63	0

Minta jele	Zn (at %)	Cu (at %)
C—0	0	0
C—1	0	0,69
C—2	0	1,23
C—3	0	1,57
C—4	0	1,86
C—5	2,04	0
C—6	2,04	0,69
C—7	2,04	1,23
C—8	2,04	1,57
C—9	2,04	1,86

	Zn (at %)	Fe (at %)
ZF—1	1,47	0
ZF—5	1,47	0,0025
ZF—6	1,47	0,01
ZF—7	1,48	0,05
ZF—2	2,13	0
ZF—9	2,13	0,0025
ZF—10	2,13	0,01

	Zn (at %)	Si (at %)
AS—1	0	0,05
AS—2	0	0,10
AS—3	0	0,15
AS—4	0	0,20
ZS—1	1,48	0
ZS—2	1,48	0,05
ZS—3	1,48	0,10
ZS—4	1,48	0,15
ZS—5	1,48	0,20
ZS—6	2,13	0
ZS—7	2,13	0,05
ZS—8	2,13	0,10
ZS—9	2,13	0,15
ZS—10	2,13	0,20

	Zn (at %)	Y (at %)
ZY—0	0	0
ZY—1	0	0,021
ZY—2	0	0,045
ZY—3	1,53	0
ZY—4	1,53	0,021
ZY—5	1,53	0,045
ZY—6	3,26	0
ZY—7	3,26	0,021
ZY—8	3,26	0,045

A radioaktív réteg leválasztása előtt a hengeres próbatestek egyik lapját előbb csiszolópapíron lecsiszoltuk, esetleg mechanikai úton is políroztuk, majd kétlépcsős maratóst végeztünk. A mintákat 340—350 K-os, 50 g/dm³ koncentrációjú NaOH oldatba mártottuk 10, ..., 30 s-ig, majd vízben való öblítés után 2, ..., 5 s-ig szoba-hőmérsékletű salétromsav és víz 1:1 arányú oldatába merítettük.

Az aktív cinkréteget kétféle eljárással vittük fel az előkészített felületre. Tiszta alumíniumra cementálással a következő cinkelő fürdőt felhasználva választottuk le az egyenletes, szürke színű, matt cink réteget: $400 \text{ g/dm}^3 \text{ NaOH} + 120 \text{ g/dm}^3 \text{ ZnSO}_4 + 5, \dots, 10 \text{ g/dm}^3 \text{ Rochelle-só}$ [73]. Fém-mikroszkópos ellenőrzéseink szerint a réteg vastagsága $1\text{--}2 \mu\text{m}$ volt. Ez a módszer jól alkalmazható tiszta alumíniumra, de az ötvözetekben a koncentráció növekedésével megbízhatatlan eredmények adódtak. Ezért a [70]-ben megadott galvánfürdő receptet kicsit módosítva a többi mintára galvanikus eljárást alkalmaztunk [103]. Az aktív mártó, illetve galvanizáló fürdőt az MTA Izotóp Intézetéből származó ^{65}Zn -re nézve 33 mC/g fajlagos aktivitású, 1 n kénsavban oldott $^{65}\text{ZnSO}_4$ oldatból készítettük [103].

4.2. Diffúziós hőkezelések

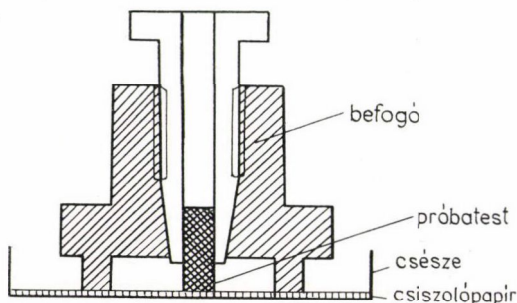
Az aktív réteggel ellátott mintákat Rasotherm üvegből készült ampullákba zártuk olyan nitrogén, illetve argon atmoszféra alatt, amely a hőkezelés hőmérsékletén megközelítőleg $0,1 \text{ MP}$ nyomást biztosított. A várhatóan kis változások kimutatása érdekében a méréseket úgy terveztük, hogy azonos körülmények között hőkezeltünk az adott ötvözettypus minden összetételére, és minden ötvözetfajtából képezett sorozat mellett referenciaként egy tiszta alumíniumot is elhelyeztünk. Néhány magas hőmérsékletű hőkezelést leszámítva (ahol két-három mintát zártunk egy kapszulába és ezeket egymás után helyeztük a kemencébe) „többlükű” kemencét használtunk, amelyben a lyukak szimmetrikusan helyezkedtek el és ezekben egyszerre az egész sorozatot tudtuk hőkezeltetni.

A hőkezeléshez használt kemencék a tanszéken készültek [105] és stabilitásuk $\pm 0,5 \text{ K}$, homogenitásuk pedig olyan volt, hogy az azonos kapszulákban levő próbatetek hőmérséklete 1 K -nál jobban nem tért el egymástól. A hőmérsékletmérés hibájából származó hibákat is figyelembe véve azt mondhatjuk, hogy a diffúziós együtthatóknak a hőmérsékletingadozásból eredő relatív hibája $\sim 2\%$.

A hőkezeléseket a 600 és 930 K között végeztük.

4.3. Szeletelés, a behatolási függvények meghatározása

A hőkezelések után a kapszulákat feltörtük és a felületi-diffúziós hatások kiküszöbölése céljából a próbatest palástjáról $0,3 \text{ mm}$ vastag réteget leestergáltuk. A sze-



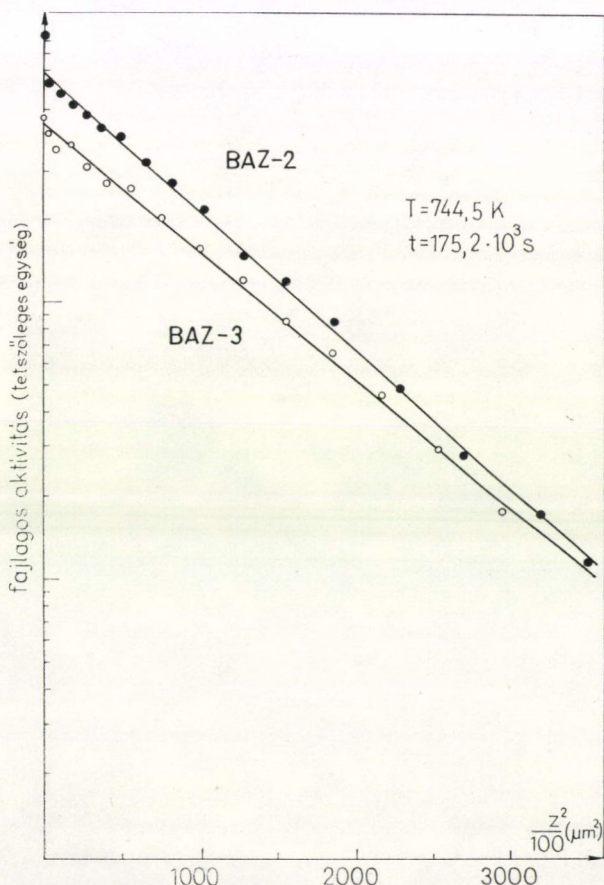
4. ábra. Próbatest-tartó csiszoláshoz

letelést metallográfiai csiszolópapírt (180-as szemcseméret) tartalmazó csészékben speciális befogó (4. ábra) alkalmazásával, majd később R. Jung (Heidelberg) márkájú fém-mikroto-mon végeztük. Az első eljárásnál (részletesen lásd még [103]) a szeletek vastagságát a próbatest tömegének változásából a sűrűség és az átmérő ismeretében határoztuk meg. A tömeget „Stanton” gyártmányú mérlegen mértük $\pm 0,01 \text{ mg}$ hibá-

val. Általában 15...20 db, egyenként 20...40 μm vastag szeletet vettünk le és így mintegy 600 μm mély tartományt vizsgáltunk meg minden próbatestben.

A szeletelés után a csészékben maradt „szeletek” aktivitásait mértük. Minthogy a cink koncentrációja arányos az aktivitással, a fajlagos (egységnyi szeletvastagságra eső) aktivitás (I) logaritmusát a behatolási mélység négyzetének a függvényében ábrázolva a (60) összefüggés alapján egyenest kell kapni. A mikrotomos szeletelés-kor egyszerűbb dolgunk volt: a szivar alakban felgöngyölödött szeletek aktivitásait kellett egyszerűen mérni és a fent leírtak szerint ábrázolni.

Az aktivitás méréséhez GAMMA gyártmányú NaI(Tl) szcintillációs detektort és házi készítésű számlálót használtunk. Ez utóbbi berendezés korszerű félvezető áramkörü elemekkel készült, így üzemi paraméterei az eredeti GAMMA gyártmányú számlálóét lényegesen felülmúlták. A 245 nap felezési idejű ^{65}Zn izotóp γ -sugárzását mértük integrális üzemmódban. A mérések idejét úgy választottuk meg, hogy az

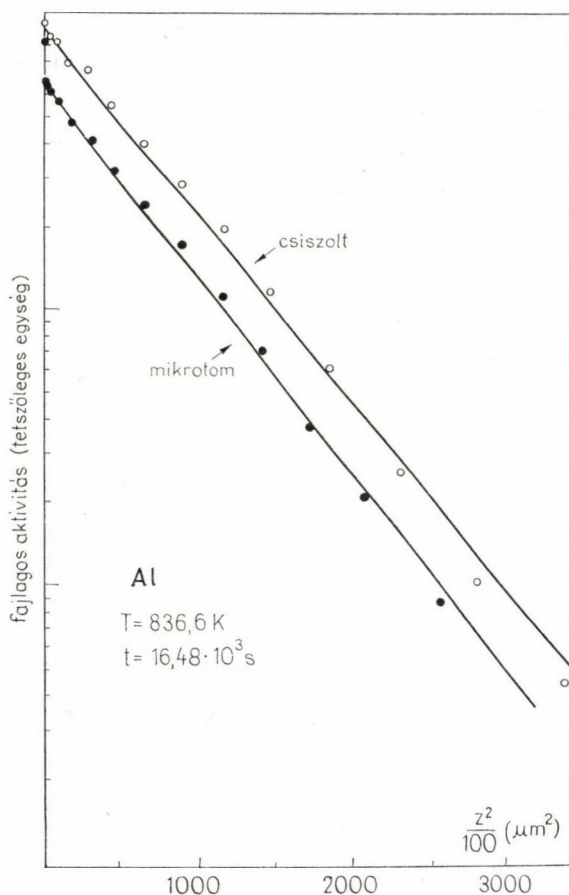


5. ábra. A csiszolt szeletek fajlagos aktivitása a behatolási mélység négyzetének függvényében különböző Zn-tartalomnál

impulzusszám 10 000 legyen, azaz az aktivitás mérésének hibája általában 1—2% volt. A mérésnek ennél a részénél a geometriai elrendezés azonos voltára is gondosan ügyeltünk. A hőkezelési időket úgy választottuk meg, hogy a vizsgált, körülbelül 600 μm mély tartományban a fajlagos aktivitás másfél, két nagyságrendet csökkenjék.

Két, csiszolással meghatározott, jellemző behatolási függvényt mutat az 5. ábra azonos körülmények között hőkezelt, különböző cinktartalmú próbatestekben. Látható, hogy a $\lg I \sim z^2$ kapcsolat szép egyenes, és a két meredekség — azaz a diffúziós együtthatók — közötti eltérés is egyértelműen megállapítható.

Meg kell jegyezni, hogy a szeletelést általában esztergapadon vagy mikrotommal szokás végezni [5]. Kezdetben sajnos, ilyen berendezés nem állt rendelkezésre, így kénytelenek voltunk a csiszolósos eljárást kidolgozni, és a mérések nagy részét is ilyen módon végeztük. Közben a tanszék kapott egy modern fémmikrotomot és ezután



6. ábra. A csiszolt és mikrotommal vágott szeletek fajlagos aktivitása alumíniumban a behatolási mélység négyzetének függvényében

ezt használtuk a szeleteléshez. A 6. ábra mutatja annak az ellenőrző mérésnek az eredményét, amelyet két azonos módon kezelt tiszta alumínium mintán végeztünk. Látható, hogy a kétféle szeletelési eljárásból kapott behatolási függvények párhuzamosak, hibahatáron belül ugyanazt a diffúziós együtthatót adják.

4.4. A mérések lehetséges hibái

A szeleteléses technikával végzett térfogati diffúziós vizsgálatoknál fellépő hibaforrásokról több közleményben is részletesen szólnak (lásd pl. [106, 107]) és többféle csoportosítás is elképzelhető tárgyalásukkor. A dolgozatban a fellépő szisztematikus és egyéb hibákat a következő módon csoportosítjuk:

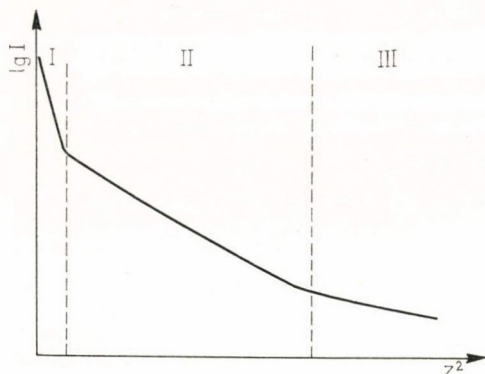
- a) Közvetlenül az alkalmazott technika (szeletelés, hőkezelés, aktivitásmérés, véges vastag felületi réteg) pontatlanságából eredő hibák.
- b) A felületi pillanat-forrás feltételtől való minden eltérésből (rosszul tapadó réteg, a tracer párolgása, rossz oldékonyság stb.) származó hibák. Az ilyen típusú hibák hatását összefoglaló néven felületközeli effektusnak (near surface effect: NSE) nevezik.
- c) A szemcsehatárok, diszlokációk, felületek mentén történő anyagtranszportból származó hibák („rövidzár effektusok”).

Az a) csoportba sorolható, a kemence hőmérsékletének pontatlanságából, valamint az aktivitás méréseiből eredő hibákról a 4.2. és 4.3. fejezetekben már szoltunk. Ebbe a csoportba tartozik még az a hatás is, amelyet az okoz, hogy viszonylag rövid hőkezelési időknél a kapszulákban levő minta felmelegedési és lehűlési ideje összemérhető a hőkezelés időtartamával. Kontroll méréseink szerint csak egy-két esetben, az olvadáspont közelében volt szükség a [107]-ben ismertetett korrekció elvégzésére, és ez is csak ~2%-os változást eredményezett D -ben. Szisztematikus hibát okozhat az is, hogy a hőtágulás miatt a minta méretei mások szobahőmérsékleten, mint a hőkezelés hőmérsékletén [107]. Az ebből származó korrekciók még magas hőmérsékleteknél sem nagyobbak 3%-nál. A túl vastag szeletek levételéből származó hibák [107] szerint esetünkben elhanyagolhatóak voltak, minthogy a szeletek vastagsága mindig kisebb volt mint $0,1\sqrt{Dt}$. A szeletelés párhuzamosságát a csiszolásnál a helyesen elkészített befogó és a kellő begyakorlásból eredő rutin biztosította. (A próbatest palástján elhelyezett jelzés segítségével elértem, hogy újabb befogáskor a minta mindig ugyanabba a helyzetbe kerüljön vissza.) A mikrotomos szeletelésnél csak az első szeletnek az eredeti felülettel való párhuzamosságát kellett figyelni; ez a ferdeség általában kisebb volt mint $30\mu\text{m}$. A felületi véges réteg vastagságából származó relatív hiba [107] szerint első közelítésben d/z -vel egyenlő, ahol d a réteg vastagsága és z a behatolási mélység. Figyelembe véve, hogy $d \sim 1\text{--}2\mu\text{m}$, és hogy a szeletek vastagsága 20 és $40\mu\text{m}$ közé esett, az első egy-két szelet kivételével ez sem okozott említésre méltó hibát.

Felvetődött annak lehetősége, hogy a hőkezelések során az ötvöző atomok kipárolgásából származó veszteségek meghamisíthatják a koncentrációfüggésre vonatkozó eredményeket. [108] szerint azonban a cink kipárolgása gyakorlatilag elhanyagolható és magnéziumra (amely a többi ötvöző közül a legillékonyabb) 773 K-on 6 órás hőkezelés után mintegy $60\mu\text{m}$ -es rétegben tapasztaltak jelentős elszegényedést. Minthogy az előkezelések után a minták felületét újra csiszoltuk,

illetve a diffúziós hőkezelések után a palástból is egy 300 μm vastag réteget leesztergáltunk, feltehető, hogy ezek a hibák is elhanyagolhatóak.

Feltételezve, hogy a szeleteléshez alkalmazott eljárásból eredő hibák elhanyagolhatóak, Lundy és Padgett [109] megállapítják, hogy a *b)* és *c)* csoportba tartozó hatások



7. ábra. A felületközeleli (I) és a rövidzárási (III) hatások szerepe a térfogati diffúziót (II) meghatározó behatolási görbén

sok legszembetűnőbb következménye az, hogy a $\ln I \sim z^2$ behatolási függvényen eltéréseket kaphatunk a linearitástól. Ennek alapján a behatolási függvényt három tartományra osztották: I. felületközeleli effektusok, II. térfogati diffúzió, III. rövidzár effektusok tartománya (7. ábra). Az I., II., III. tartományok kiterjedése, egymáshoz viszonyított arányai a vizsgált rendszerektől, a rétegek elkészítési módjától, az alkalmazott kiértékelési eljárástól függően igen eltérőek lehetnek, és az egyes tartományok átlapolása kérdésessé teheti a térfogati diffúziós együttható pontos meghatározását is.

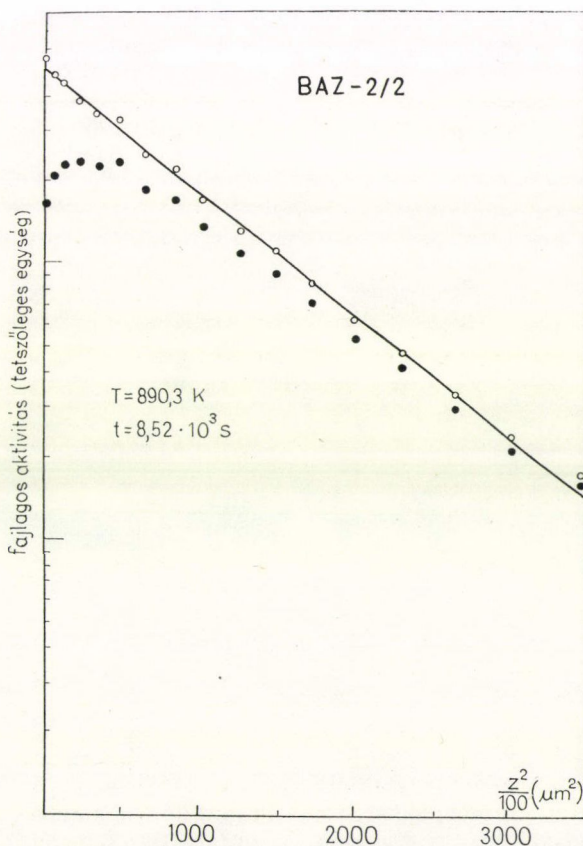
A [110] közleményben összefoglaltuk és elemeztük azokat az effektusokat,

amelyek a behatolási függvény első szakaszán a 7. ábra szerinti pozitív eltéréseket eredményezhetik. Azokat a hatásokat, amelyek a *b)* ponthoz sorolható okok miatt váltják ki a behatolási görbén a pozitív eltérést (formálisan ugyanis az *a)* csoporthoz felsorolt hatások is eredményezhetnek ilyet) az irodalomban felületközeleli visszatartásnak, „near surface holdup”-nak (NSH) nevezik. Lényegében a NSH-ra vonatkozó elméleti modelleket foglaltuk össze [110]-ben és megállapítottuk, hogy mindegyik modellben a diffúziós együttható hibája a behatolási mélység növelésével csökken, viszont a hőkezelési időtől különböző módon függ. Ez lehetőséget ad arra, hogy adott esetben a hőkezelési idő változtatásával el tudjuk dönteni a NSH okát, és így biztosabban el tudjuk kerülni az ebből származó hibákat. Konkrét mérésenként ^{110}Ag diffúzióját vizsgáltuk polikristályos alumíniumban és azt találtuk, hogy a hiba a hőkezelési idő növelésével csökkent, és az eredményeket a tracer szakaszos belépésére vonatkozó [107] modell továbbfejlesztésével sikerült értelmezni. Megmutattuk, hogy előfordulhatnak olyan esetek is, amikor a behatolási függvény egyenes, de az ebből számított diffúziós együtthatók értéke jelentős hibát tartalmaz. Ezért arra a következtetésre jutottunk, hogy minden olyan esetben, amikor bármilyen kétség felmerülhet a felvételi technikával kapcsolatban, célszerű egy-két hőmérsékleten több különböző időnél elvégezni a diffúziós együttható meghatározását.

Az általunk alkalmazott mindkét felvételi eljárásra elvégeztük ezeket az ellenőrző méréseket [73, 103] (egyébként csaknem minden esetben a behatolási függvény szép egyenes volt), és azt kaptuk, hogy — bár abban az időben csaknem valamennyi szerző csak a vákuumpárológatással felvitt rétegek [45] vagy az [55]-ben alkalmazott felvételi eljárás esetén tartotta lehetségesnek alumíniumban a helyes diffúziós együtthatók meghatározását [49] — az egyszerű cementálás és a galvanikus eljárások is jó eredményre vezethetnek a felület megfelelő előkészítése és a szükséges kontroll mérések pozitív eredményei esetén.

Megjegyezzük, hogy gyakorlatilag csak egyetlen olyan *b*) csoportba tartozó hatás van, amely negatív NSE-t (az első szakasz lefelé hajlik) vált ki; ez a tracer atomok párolgása [107, 111]. Néhányszor mi is észleltünk ilyen effektust. Erre mutat egy példát a 8. ábra, ahol már az is látható, hogy a [111]-ben adott eljárás segítségével elvégezve a korrekciót milyen egyenes adódik. A korrigált egyenes meredeksége $\sim 10\%$ -kal tér el az eredeti behatolási függvény hátsó szakaszából meghatározott értéktől.

A *c*) csoportba tartozó hatások esetünkben a szemcsehatárok és a diszlokációk jelenléte miatt léphetnek fel. A [110] közleményben azt is megállapítottuk, hogy NSH jelenlétében a rövidzár effektusok is felerősödnek, és ez a hatás az ^{110}Ag diffúziója esetén a hőkezelési idő növekedésével csökkent. Megmutatható, hogy az általunk használt szemcseméret, hőmérséklet és hőkezelési idők esetén ha a behatolási függvény egyenes, a mért diffúziós együtthatóban fellépő szemcsehatár, illetve diszlokációs járulékok elhanyagolhatóak [112]. Minthogy a behatolási függvényekre legtöbbször jó egyenesek adódtak (csak néhány vastartalmú ötvözetben fordult elő,



8. ábra. Párolgás okozta hiba és korrekciója,
● mért értékek, ○ korrigált adatok

hogy az utolsó egy-két pont magasabbra esett) ezeket a hibákat is elhanyagolhatjuk.

Végül megjegyezzük, hogy a meredekséget és így a diffúziós együtthatókat a legkisebb négyzetek módszerével számoltuk ki és a pontok szórásából származó hiba általában 2–3% volt.

4.5. Eredmények

Valamennyi kísérletileg meghatározott diffúziós együttható értékét tartalmazták az 5., ..., 10. táblázatok. A hőkezelési időket nem tüntettük fel: értékük a 400–600 μm behatolási mélységnek megfelelően, a hőmérséklettől függően, a néhány perctől néhány hétig terjedő intervallumba esett.

A kapott együtthatók valamennyi ötvözetben követik a (27) Arrhenius-törvényt. Példaként a BAZ–3, BAZ–6 és az AlZn mintákkal együtt tiszta alumíniumban mért értékekre mutatja ezt a 9. ábra. Látható, hogy a diffúziós együtthatók logarit-

5. TÁBLÁZAT

^{65}Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója Al-Zn ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)
Al–2	889,9	256	BAZ–3/7	688,9	2,60
Al–3	842,5	103	BAZ–3/5	659,5	1,09
Al–4	792,2	32,0	BAZ–3/8	625,1	0,389
Al–6	744,2	9,69	BAZ–3/9	614,2	0,244
Al–7	688,9	2,09			
Al–5	659,5	0,710	BAZ–4/2	890,2	307
Al–8	629,2	0,360	BAZ–4/3	842,5	132
Al–9	614,2	0,188	BAZ–4/4	792,4	42,4
			BAZ–4/6	744,5	13,8
BAZ–1/2	889,2	266	BAZ–4/7	688,9	3,08
BAZ–1/3	842,5	113	BAZ–4/5	659,5	1,05
BAZ–1/4	792,2	38,6	BAZ–4/8	625,1	0,381
BAZ–1/6	744,2	11,7	BAZ–4/9	614,2	0,281
BAZ–1/7	688,9	2,36			
BAZ–1/5	659,5	0,930	BAZ–5/2	890,5	333
BAZ–1/8	629,2	0,412	BAZ–5/3	842,5	145
BAZ–1/9	614,2	0,212	BAZ–5/4	792,4	41,8
			BAZ–5/6	744,5	14,1
BAZ–2/2	890,2	285	BAZ–5/7	688,9	2,73
BAZ–2/3	842,5	107	BAZ–5/5	662,7	1,33
BAZ–2/4	792,4	38,1	BAZ–5/8	625,1	0,404
BAZ–2/6	744,5	12,3	BAZ–5/9	614,2	0,284
BAZ–2/7	688,9	2,50			
BAZ–2/5	659,5	1,00	BAZ–6/2	890,5	368
BAZ–2/8	625,1	0,348	BAZ–6/3	842,5	139
BAZ–2/9	614,2	0,251	BAZ–6/4	792,4	45,9
			BAZ–6/6	744,5	15,4
BAZ–3/4	792,4	40	BAZ–6/7	688,9	3,09
BAZ–3/6	744,5	13,3	BAZ–6/5	662,7	1,47
			BAZ–6/8	625,1	0,421
			BAZ–6/9	614,2	0,316

6. TÁBLÁZAT

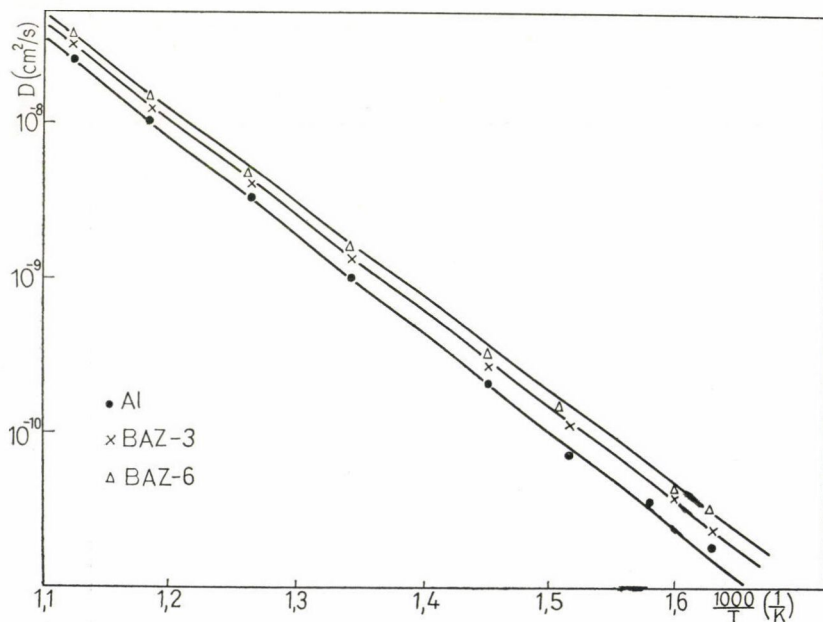
 ^{65}Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója AlMg és AlZnMg ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)
Al—5	848,2	129	MZ—40/3	783,0	33,4
Al—3	783,0	26,8	MZ—40/4	759,7	20,5
Al—6	759,7	12,2	MZ—40/5	727,7	9,02
Al—4	727,6	6,71	MZ—40/6	696,0	3,58
Al—2	696,3	2,78			
MZ—10/11	910,3	358	MZ—13/1	883,1	260
MZ—10/1	889,2	298	MZ—13/6	848,2	127
MZ—10/6	848,2	112	MZ—13/2	843,2	115
MZ—10/2	844,1	97,2	MZ—13/7	809,2	58,3
MZ—10/7	808,2	52,0	MZ—13/3	795,5	44,5
MZ—10/3	795,5	37,3	MZ—13/9	782,7	30,0
MZ—10/9	782,7	28,2	MZ—13/10	759,7	19,3
MZ—10/10	758,9	15,9	MZ—13/4	745,6	12,0
MZ—10/4	745,6	9,90	MZ—13/5	727,7	8,17
MZ—10/5	727,6	6,69	MZ—13/8	696,3	3,47
MZ—10/8	696,3	2,87			
MZ—12/1	883,1	231	MZ—15/1	883,1	299
MZ—12/6	848,2	118	MZ—15/6	848,2	132
MZ—12/2	844,0	110	MZ—15/2	843,7	127
MZ—12/7	808,4	55,9	MZ—15/7	807,5	62,6
MZ—12/3	795,5	34,1	MZ—15/3	795,5	45,4
MZ—12/9	782,7	32,8	MZ—15/R ₁	782,7	33,9
MZ—12/10	759,7	16,3	MZ—15/R ₂	759,7	19,4
MZ—12/4	745,6	10,6	MZ—15/4	745,6	12,4
MZ—12/5	727,6	7,20	MZ—15/8	727,7	8,57
MZ—12/8	696,3	3,13	MZ—15/5	696,0	3,78
MZ—22/1	848,2	138	MZ—20/1	848,2	122
MZ—22/2	807,5	56,0	MZ—20/2	809,2	51,6
MZ—22/3	782,6	32,0	MZ—20/3	782,7	29,4
MZ—22/4	759,7	19,3	MZ—20/4	758,9	16,7
MZ—22/5	727,2	7,99	MZ—20/5	727,7	7,53
MZ—22/6	696,0	3,47	MZ—20/6	696,0	2,99
MZ—23/1	848,2	138	MZ—60/1	848,2	219
MZ—23/2	807,5	63,7	MZ—60/2	808,4	68,3
MZ—23/3	782,6	32,6	MZ—60/3	783,0	40,6
MZ—23/4	759,7	18,4	MZ—60/4	759,7	21,0
MZ—23/5	727,7	8,49	MZ—60/5	727,7	12,9
MZ—23/6	696,0	3,90	MZ—60/6	696,0	4,33
MZ—25/1	848,2	149			
MZ—25/2	808,4	64,9			
MZ—25/3	783,0	37,6			
MZ—25/4	759,7	21,2			
MZ—25/5	727,7	10,5			
MZ—25/6	696,0	4,07			
MZ—40/1	848,2	147			
MZ—40/2	809,2	61,5			

7. TÁBLÁZAT

^{65}Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója AlZnFe ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm^2/s)
ZF—1/1	882,6	282	ZF—7/1	882,6	277
ZF—1/2	835,8	90,3	ZF—7/2	835,8	120
ZF—1/3	783,7	30,0	ZF—7/3	783,7	31,2
ZF—1/4	732,6	8,43	ZF—7/4	732,6	8,73
ZF—2/1	882,6	298	ZF—9/1	882,6	255
ZF—2/2	835,8	124	ZF—9/2	835,4	101
ZF—2/3	783,7	31,2	ZF—9/3	783,7	33,8
ZF—2/4	732,6	8,48	ZF—9/4	732,6	8,73
ZF—5/1	882,6	282	ZF—10/1	882,6	268
ZF—5/2	835,8	101	ZF—10/2	835,4	102
ZF—5/3	783,7	30,8	ZF—10/3	783,7	35,0
ZF—5/4	732,6	8,78	ZF—10/4	732,6	9,27
ZF—6/1	882,6	279			
ZF—6/2	835,8	91,6			
ZF—6/3	783,7	28,9			
ZF—6/4	732,6	8,34			



9. ábra. Arrhenius-egyenesek ^{65}Zn diffúziójára tiszta alumíniumban és két AlZn ötvözetben; a hibákat a jelek méretei jelzik

8. TÁBLÁZAT

 ^{65}Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója AISi és AlZnSi ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)
Al—1A	836,6	92,7	AS—3/4	753,0	15,6
Al—1B	836,3	90,6	AS—3/5	716,9	5,97
Al—2	794,7	36,7	AS—3/6	673,6	1,39
Al—3	753,0	14,7			
Al—4	753,0	14,2	AS—4/1	836,6	103
Al—5	716,9	5,84	AS—4/2	794,7	36,9
Al—6	673,6	1,36	AS—4/3	753,0	16,0
			AS—4/4	753,0	16,1
AS—1/1	836,6	88,4	AS—4/5	716,9	6,69
AS—1/2	794,7	38,0	AS—4/6	673,6	1,44
AS—1/3	753,0	15,6			
AS—1/4	753,0	15,5	ZS—1/1	836,3	101
AS—1/5	716,9	5,68	ZS—1/2	794,7	42,6
AS—1/6	673,6	1,44	ZS—1/3	753,0	15,5
			ZS—1/4	753,0	16,4
AS—2/1	836,6	91,9	ZS—1/5	716,9	6,29
AS—2/2	794,7	38,1	ZS—1/6	673,6	1,72
AS—2/3	753,0	14,4			
AS—2/4	753,0	14,0	ZS—2/1	836,3	103
AS—2/5	716,9	5,69	ZS—2/2	794,7	43,0
AS—2/6	673,6	1,39	ZS—2/3	753,0	16,7
			ZS—2/4	753,0	15,9
ZS—3/1	836,3	113	ZS—2/5	716,0	6,50
ZS—3/2	794,7	42,2	ZS—2/6	673,6	1,51
ZS—3/3	753,0	16,0			
ZS—3/4	753,0	16,5	ZS—7/1	836,3	102
ZS—3/5	716,9	6,07	ZS—7/2	794,7	45,1
ZS—3/6	673,6	1,64	ZS—7/3	753,0	17,7
			ZS—7/4	753,0	17,5
ZS—4/1	836,3	101	ZS—7/5	716,9	6,45
ZS—4/2	794,7	42,7	ZS—7/6	673,6	1,81
ZS—4/3	753,0	16,3			
ZS—4/4	753,0	16,7	ZS—8/1	836,3	112
ZS—4/5	716,9	5,98	ZS—8/2	784,7	43,9
ZS—4/6	673,6	1,63	ZS—8/3	753,0	17,6
			ZS—8/4	753,0	16,7
ZS—5/1	836,3	106	ZS—8/5	716,9	6,63
ZS—5/2	794,7	43,1	ZS—8/6	673,6	1,81
ZS—5/3	753,0	17,1			
ZS—5/4	753,0	17,9	ZS—9/1	836,3	113
ZS—5/5	716,9	6,55	ZS—9/2	794,7	47,3
ZS—5/6	673,6	1,61	ZS—9/3	753,0	16,6
			ZS—9/4	753,0	18,0
ZS—6/1	836,3	108	ZS—9/5	716,9	6,65
ZS—6/2	794,7	41,9	ZS—9/6	673,6	1,67
ZS—6/3	753,0	15,9			
ZS—6/4	753,0	17,1	ZS—10/1	836,3	104
ZS—6/5	716,9	6,46	ZS—10/2	794,7	47,8
ZS—6/6	673,6	1,64	ZS—10/3	753,0	17,2
			ZS—10/4	753,0	16,6
AS—3/1	83,66	93,5	ZS—10/5	716,9	6,84
AS—3/2	794,7	39,4	ZS—10/6	673,6	1,69
AS—3/3	753,0	15,5			

9. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója AlCu és AlZnCu ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)
C—0/1	893,2	241	C—2/7	714,1	4,60
C—0/2	853,9	112			
C—0/3	843,2	86,4	C—3/1	854,7	132
C—0/4	813,2	45,6	C—3/2	853,9	131
C—0/5	779,7	20,3	C—3/3	843,4	109
C—0/6	754,0	13,8	C—3/4	813,2	58,5
C—0/7	714,1	4,40	C—3/5	779,7	26,2
			C—3/6	754,0	13,7
C—1/1	893,2	224			
C—1/2	853,9	127	C—4/3	843,4	113
C—1/3	843,2	90,4	C—4/1	828,9	89,7
C—1/4	813,2	51,0	C—4/4	813,2	61,4
C—1/5	779,7	23,1	C—4/2	794,0	38,8
C—1/6	754,0	12,6	C—4/5	779,7	26,9
C—1/7	714,1	5,00			
C—2/1	871,7	186	C—5/1A	893,2	263
C—2/2	853,9	112	C—5/1B	893,2	270
C—2/3	843,4	110	C—5/2	853,9	129
C—2/4	813,2	51,9	C—5/3	843,4	100
C—2/5	779,7	27,1	C—5/4	813,2	57,6
C—2/6	754,0	12,9	C—5/5	779,7	26,1
			C—5/6	754,0	14,7
			C—5/7	714,1	5,10
C—6/2	853,9	131	C—8/1	854,7	157
C—6/3	843,4	112	C—8/2	853,9	151
C—6/4	813,2	62,7	C—8/3	843,4	115
C—6/5	779,7	27,6	C—8/4	813,2	68,5
C—6/6	754,0	15,9	C—8/5	779,7	31,8
C—6/7	714,1	5,30	C—8/6	754,0	16,8
C—7/1	871,7	213	C—9/3	843,2	133
C—7/2	853,9	146	C—9/1	828,9	100
C—7/3	843,4	110	C—9/4	813,2	71,8
C—7/4	813,2	62,6	C—9/2	794,0	45,9
C—7/5	779,7	28,9	C—9/5	779,7	33,2
C—7/6	754,0	17,5			
C—7/7	714,1	6,00			

musa valóban lineárisan függ $1/T$ -től; ennek alapján a legkisebb négyzetek módszerével meghatároztuk az aktivációs entalpiák és a preexponenciális faktorok értékét, valamint ezek hibáit. A kapott eredményeket tartalmazza a 11., ..., 15. táblázat. Az AlY és AlYZn ötvözetekre ilyen kiértékelést nem végeztünk, minthogy csak két hőmérsékleten mértünk; ebben az esetben csak a koncentrációtól való függés meghatározása volt a célunk.

Tiszta alumíniumban — láthatóan — több alkalommal vizsgáltuk a hőmérséklet-függést is. Lényegében minden ötvözetfajtára referenciaként határoztuk meg ezeket a diffúziós együtthatókat. A kapott Q és D_0 értékek között az egyezés jó; ez bizto-

10. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn különböző hőmérsékleten mért diffúziós együtthatója AlY és AlZnY ötvözetekben

Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)	Próbatest jele	Hőmérséklet (K)	$D \cdot 10^{10}$ (cm ² /s)
ZY—0/1	855,7	115	ZY—5/1	855,7	128
ZY—0/2	779,4	23,2	ZY—5/2	779,4	25,9
ZY—0/3	779,4	22,9	ZY—5/3	779,4	27,2
ZY—1/1	855,7	116	ZY—6/1	855,7	149
ZY—1/2	779,4	23,1	ZY—6/2	779,4	30,7
ZY—1/3	779,4	21,8	ZY—6/3	779,4	30,8
ZY—2/1	855,7	114	ZY—7/1	855,7	151
ZY—2/2	779,4	21,2	ZY—7/2	779,4	31,7
ZY—2/3	779,4	22,9	ZY—7/3	779,4	31,4
ZY—3/1	885,7	122	ZY—8/1	855,7	153
ZY—3/2	779,4	25,7	ZY—8/2	779,4	31,1
ZY—3/3	779,4	27,1	ZY—8/3	779,4	31,4
ZY—4/1	885,7	130			
ZY—4/2	779,4	26,7			
ZY—4/3	779,4	26,9			

11. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn diffúziós aktivációs entalpiája és preexponenciális faktora AlZn ötvözetekben

Minta jele	Q (eV)	D_0 (cm ² /s)
Al	1,247 ± 0,017	0,27 ± 0,07
BAZ—1	1,233 ± 0,009	0,25 ± 0,03
BAZ—2	1,209 ± 0,012	0,18 ± 0,02
BAZ—3	1,218 ± 0,012	0,22 ± 0,04
BAZ—4	1,213 ± 0,013	0,22 ± 0,04
BAZ—5	1,217 ± 0,016	0,24 ± 0,05
BAZ—6	1,211 ± 0,012	0,23 ± 0,04

sítja, hogy a különböző anyagokon végzett mérések eredményei egymással is összevethetők. A 10. ábrán látható az összes tiszta alumíniumban mért adat egyetlen Arrhenius-típusú függvényben összerajzolva és a dolgozatban feltüntetett adatokon kívül a KLTE Alkalmazott Fizikai Tanszékén hasonló technikával korábban mért [73] együtthatókat is ábrázoltuk. Az összesen 50 darab kísérleti adat alapján meghatározott aktivációs entalpia és preexponenciális faktor értékek a következők: $Q = (1,239 \pm 0,009)$ eV, $D_0 = (0,245 \pm 0,033)$ cm²/s.

A diffúziós együtthatók koncentrációfüggését jellemző $\lg D \sim c$ függvényeket mutatják példaként a 11., ..., 17. ábrák különböző hőmérsékleteken. Látható, hogy az együtthatók logaritmusai lineárisan függ a koncentrációtól és az egyenesek meredeksége gyengén változik a hőmérséklettel. Az ábrákon az üres karikák azt jelzik, hogy az adott összetételekre ezeknél a hőmérsékleteknél nem végeztünk méréseket

12. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós aktivációs entalpiája és preexponenciális faktora AlMg és AlZnMg ötvözetekben

Minta jele	Q (eV)	D_0 (cm ² /s)
Al	$1,275 \pm 0,084$	$0,41 \pm 0,13$
MZ—10	$1,259 \pm 0,067$	$0,34 \pm 0,09$
MZ—12	$1,235 \pm 0,083$	$0,25 \pm 0,08$
MZ—13	$1,223 \pm 0,051$	$0,23 \pm 0,04$
MZ—15	$1,239 \pm 0,066$	$0,31 \pm 0,07$
MZ—20	$1,233 \pm 0,032$	$0,24 \pm 0,03$
MZ—22	$1,233 \pm 0,047$	$0,27 \pm 0,05$
MZ—23	$1,211 \pm 0,101$	$0,21 \pm 0,08$
MZ—25	$1,193 \pm 0,058$	$0,17 \pm 0,04$
MZ—40	$1,229 \pm 0,053$	$0,28 \pm 0,06$
MZ—60	$1,255 \pm 0,250$	$0,50 \pm 0,47$

13. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós aktivációs entalpiája és preexponenciális faktora AlZnFe ötvözetekben

Minta jele	Q (eV)	D_0 (cm ² /s)
ZF—1	$1,290 \pm 0,170$	$0,58 \pm 0,38$
ZF—5	$1,288 \pm 0,091$	$0,59 \pm 0,21$
ZF—6	$1,296 \pm 0,156$	$0,62 \pm 0,37$
ZF—7	$1,306 \pm 0,129$	$0,61 \pm 0,30$
ZF—2	$1,343 \pm 0,121$	$1,39 \pm 0,67$
ZF—9	$1,251 \pm 0,060$	$0,35 \pm 0,08$
ZF—10	$1,243 \pm 0,062$	$0,32 \pm 0,07$

és az értékeket a megfelelő Arrhenius-függvényekből számoltuk ki. A koncentrációfüggést jellemző β_i^{Zn} együtthatókat (lásd (30)) és ezek hibáit a legkisebb négyzetek módszerével határoztuk meg. (Itt a felső index a diffundáló tracerre utal, az alsó pedig végigfut valamennyi ötvöző atomon.)

Az AlFeZn ötvözetekben azt kaptuk, hogy a kis vastartalom és a kísérleti pontatlanságok miatt a vas koncentrációjától való függést — ha van is ilyen — nem lehetett meghatározni. Hasonló következtetéseket lehet levonni az Y hatására vonatkozóan is. Meg kell jegyezni, hogy a vasat tartalmazó mintákban a diffúziós együtthatókat is pontatlanabban tudtuk meghatározni, mint a többi esetben. Gyakran azt figyeltük meg, hogy a behatolási függvényen az utolsó néhány pont magasabbra esett. Minthogy ezekben a mintákban ugyanolyan volt a szemcseméret, mint a többi ötvözetben, feltehető, hogy a vas ötvözők miatt megjelenő szub-szemcsehatárok, illetve a megnövekedett diszlokációsűrűség okozta ezt a tipikusan rövidzár effektust. Ezt a feltételezést az is megerősíti, hogy a vastartalom növekedésével a szemcsehatár mozgékonyság is lecsökkent. Például amíg az 50 és 200 ppm vasat tartalmazó ötvö-

14. TÁBLÁZAT

 ^{65}Zn diffúziós aktivációs entalpiája és preexponenciális faktora AlSi és AlZnSi ötvözetekben

Minta jele	Q (eV)	D_0 (cm^2/s)
AS—1	$1,225 \pm 0,030$	$0,23 \pm 0,09$
AS—2	$1,239 \pm 0,041$	$0,30 \pm 0,16$
AS—3	$1,246 \pm 0,030$	$0,32 \pm 0,15$
AS—4	$1,242 \pm 0,018$	$0,29 \pm 0,07$
Al	$1,234 \pm 0,021$	$0,26 \pm 0,07$
ZS—1	$1,212 \pm 0,009$	$0,21 \pm 0,05$
ZS—2	$1,250 \pm 0,025$	$0,37 \pm 0,13$
ZS—3	$1,255 \pm 0,012$	$0,40 \pm 0,07$
ZS—4	$1,234 \pm 0,015$	$0,29 \pm 0,07$
ZS—5	$1,240 \pm 0,026$	$0,33 \pm 0,11$
ZS—6	$1,237 \pm 0,019$	$0,31 \pm 0,07$
ZS—7	$1,209 \pm 0,019$	$0,21 \pm 0,05$
ZS—8	$1,224 \pm 0,016$	$0,26 \pm 0,05$
ZS—9	$1,256 \pm 0,017$	$0,43 \pm 0,09$
ZS—10	$1,232 \pm 0,024$	$0,29 \pm 0,09$

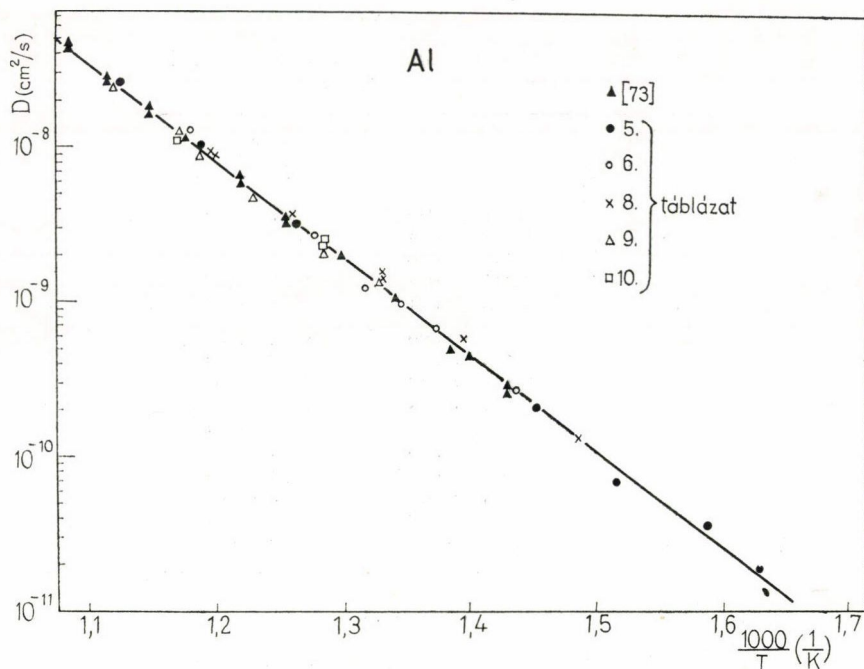
15. TÁBLÁZAT

 ^{65}Zn diffúziós aktivációs entalpiája és preexponenciális faktora AlCu és AlZnCu ötvözetekben

Minta jele	Q (eV)	D_0 (cm^2/s)
C—0	$1,212 \pm 0,030$	$0,16 \pm 0,07$
C—1	$1,194 \pm 0,024$	$0,13 \pm 0,05$
C—2	$1,244 \pm 0,039$	$0,28 \pm 0,11$
C—3	$1,253 \pm 0,014$	$0,33 \pm 0,06$
C—4	$1,298 \pm 0,400$	$0,67 \pm 0,35$
C—5	$1,212 \pm 0,009$	$0,18 \pm 0,03$
C—6	$1,212 \pm 0,018$	$0,20 \pm 0,05$
C—7	$1,197 \pm 0,020$	$0,17 \pm 0,05$
C—8	$1,205 \pm 0,025$	$0,20 \pm 0,07$
C—9	$1,246 \pm 0,031$	$0,38 \pm 0,05$

zetben ez a jelenség nem volt számottevő, 1000 és 3000 ppm-nél az ismételt kombinált szemcsenövelő kezelés (deformáció, hőkezelés 2 K-re a szolidusz alatt) sem volt hatásos. Csak néhány Al—1,47 at%, Zn—0,1 at% Fe ötvözetben kaptunk kielégítő szemcseméretet, de ezt az eredményt nem tudtuk később reprodukálni.

A többi ötvözetben már értékelhető eredményeket kaptunk, de mielőtt a diffúziós együtthatók koncentrációfüggését jellemző mennyiségeket megadnánk még egy kérdésre ki kell térnünk. Felvetődhet, hogy esetünkben a (29) vagy a (30) összefüggések írják-e le helyesebben a koncentrációfüggést. A (29) egyenlet szerinti illesztést is mindig elvégeztük, és a következő eredményeket kaptuk. AlZn ötvözetekben — ahol az eredmények a legpontosabbak voltak — az exponenciális és a lineáris



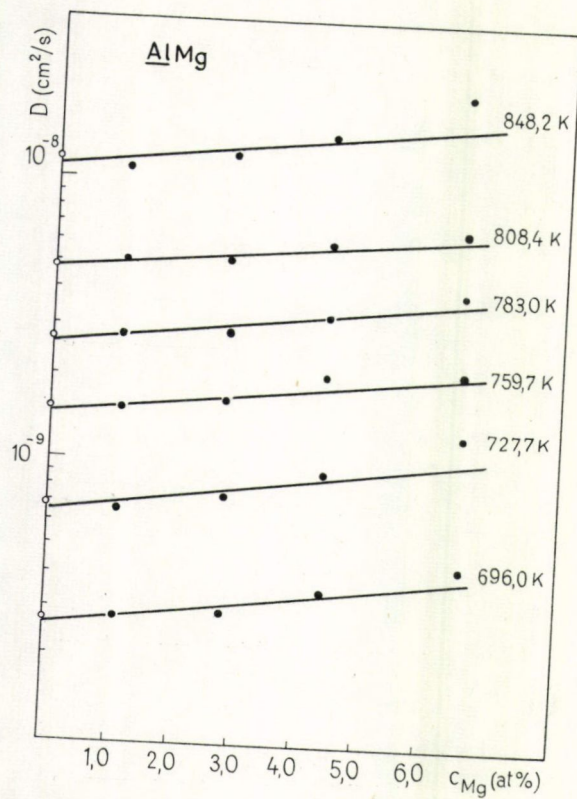
10. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatójára mért valamennyi érték az $1/T$ függvényében tiszta alumíniumban

16. TÁBLÁZAT

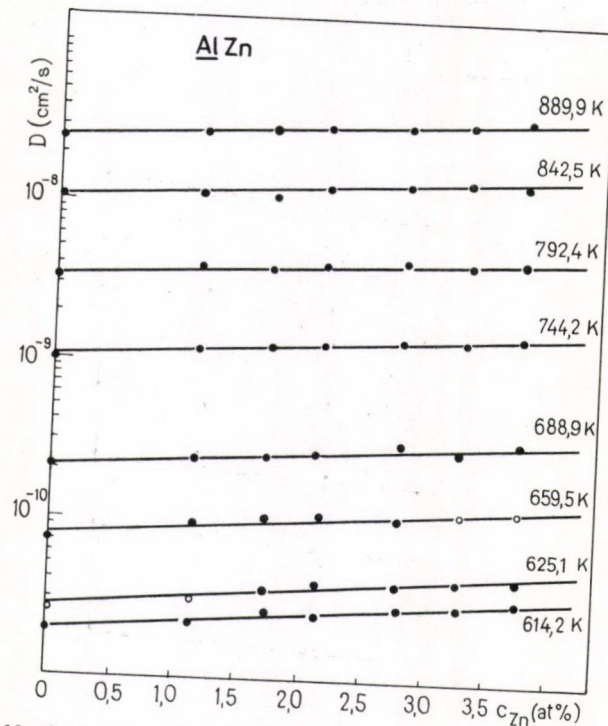
^{65}Zn diffúziós együtthatójának koncentrációfüggését jellemző együtthatók AlZn ötvözetekben

T (K)	Exponenciális	Lineáris
	$\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$	$b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$
889,9	$9,4 \pm 1,2$	$11,7 \pm 1,8$
842,5	$9,0 \pm 0,9$	$11,7 \pm 2,2$
792,2	$8,4 \pm 1,2$	$9,8 \pm 1,3$
744,2	$11,5 \pm 1,0$	$14,4 \pm 1,0$
688,9	$10,2 \pm 1,8$	$12,5 \pm 2,4$
659,5	$12,3 \pm 2,0$	$19,1 \pm 2,1$
625,1	$13,8 \pm 1,9$	$19,9 \pm 2,6$
614,2	$13,6 \pm 1,2$	$18,2 \pm 3,2$
Átlag	$10,6 \pm 0,5$	

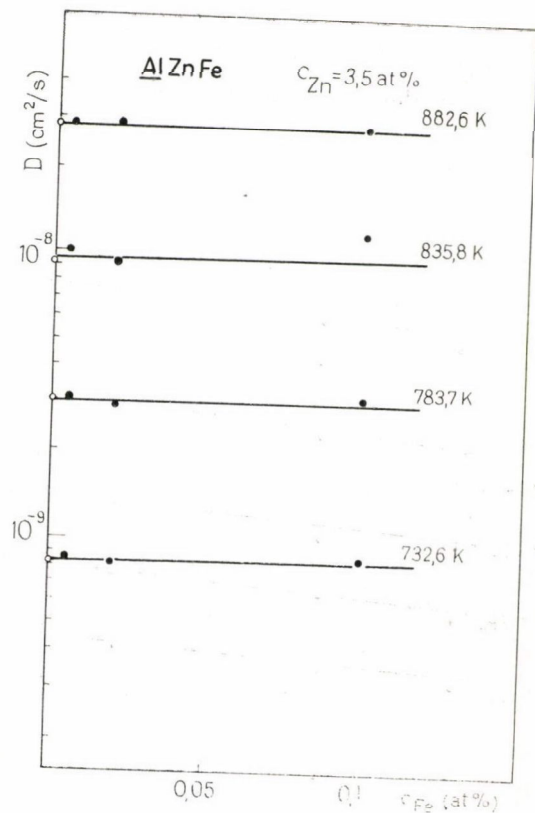
illesztésből adódó együtthatók (β_i^{Zn} , illetve b_i^{Zn}) között a három legalacsonyabb hőmérsékleten nagyobb volt az eltérés, mint az illesztésből származó hiba. A 16. táblázat tartalmazza AlZn ötvözetekre az exponenciális és a lineáris illesztésből származó gyorsítási faktorokat 1/atom tört egységekben. Látható, hogy még magasabb



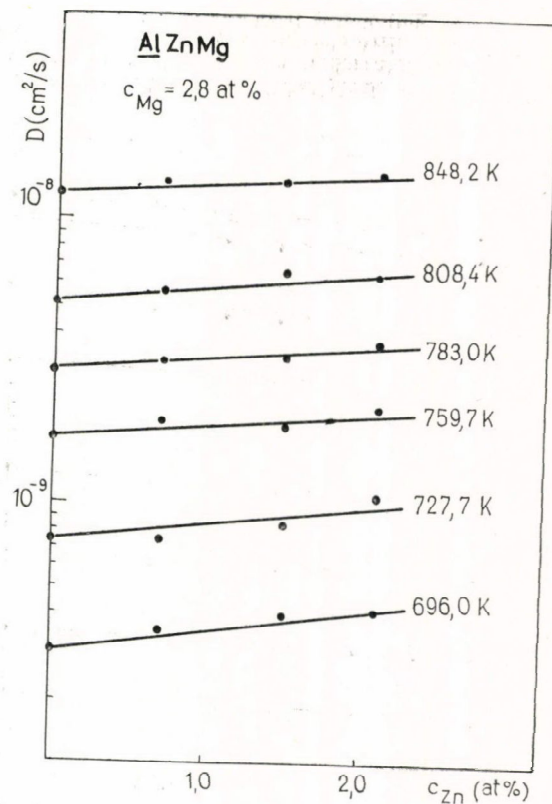
12. ábra. ⁶⁵Zn diffúziós együtthatójának koncentrációfüggése AlMg ötvözetekben



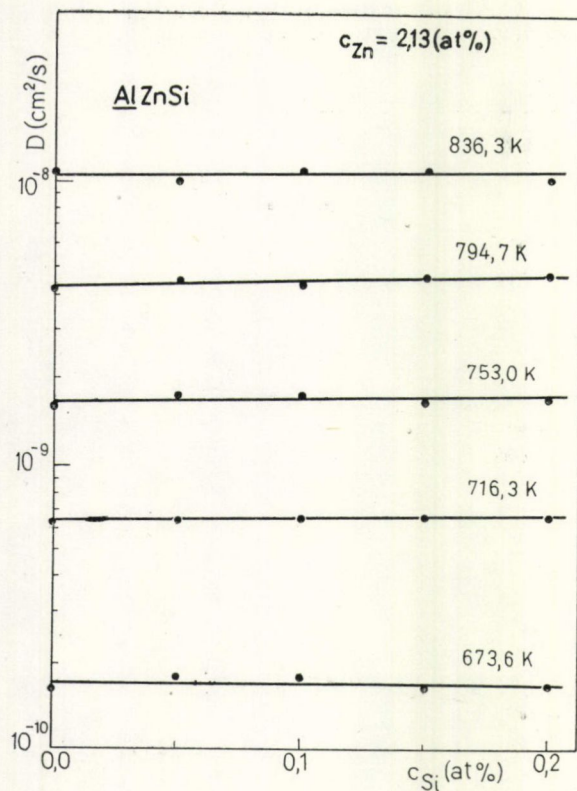
11. ábra. ⁶⁵Zn diffúziós együtthatójának koncentrációfüggése AlZn ötvözetekben (féllogaritmikus ábrázolás); az üres körökkel jelzett pontokat a megfelelő Arrhenius-egyenesekből interpolációval számítottuk



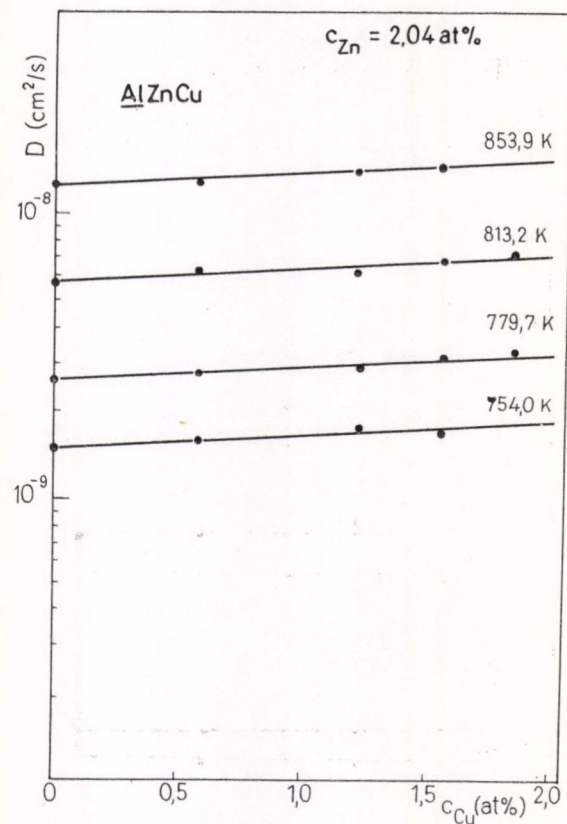
14. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatói 3,5 at% cinket tartalmazó AlZnFe ötvözetekben



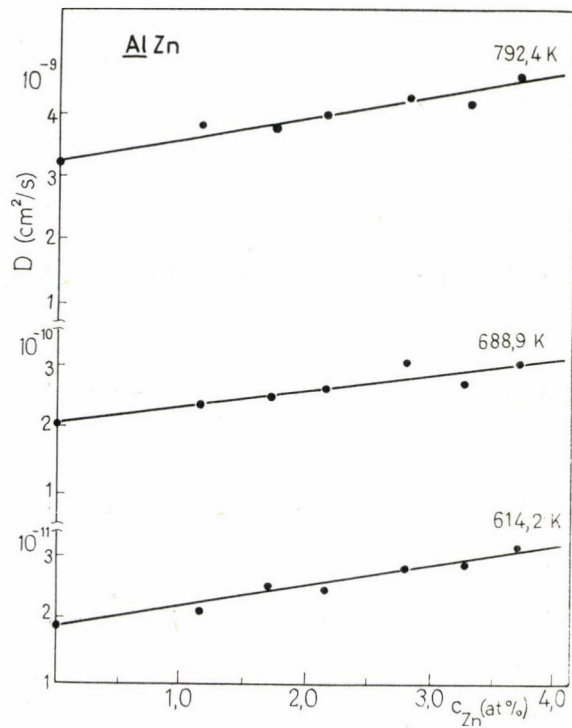
13. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatójának függése a cink koncentrációtól 2,8 at% magnéziumot tartalmazó AlZnMg ötvözetekben



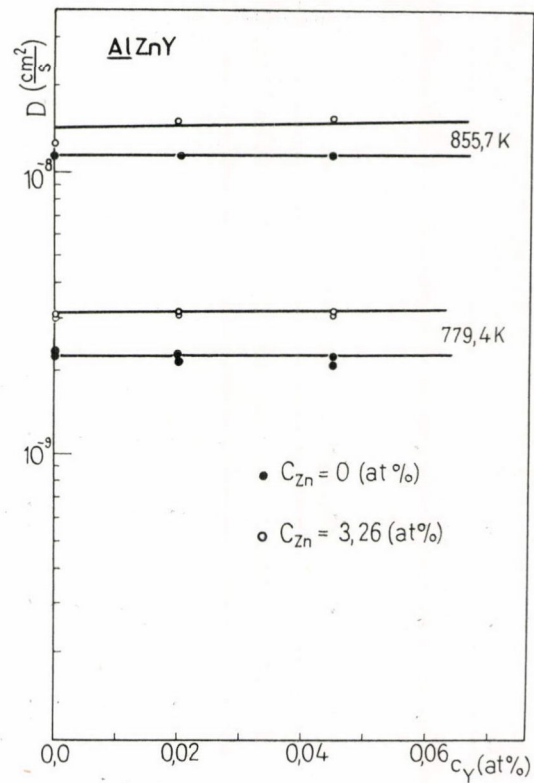
16. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatójának függése a szilícium koncentrációtól 2,13 at% cinket tartalmazó AlZnSi ötvözetekben



15. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatójának függése a réz koncentrációtól 2,04 at% cinket tartalmazó AlZnCu ötvözetekben



18. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatójának koncentrációfüggése AlZn ötvözetekben (lineáris ábrázolás)



17. ábra. ^{65}Zn diffúziós együtthatói AlY és AlZnY ötvözetekben

hőmérsékleteknél is a b_i^{Zn} értékek valamelyest nagyobbak mint a β_i^{Zn} együtthatók. Figyelembe véve, hogy a kétféle illesztésből kapott eredmények százalékos hibái lényegében megegyeznek (lásd 11. és 18. ábrák), és hogy az értelmezéshez rendelkezésre álló modellek csak a két-szennyező—vakancia hármassokat veszik figyelembe és a magasabbrendű komplexek hatását elhanyagolják (lásd (34) kifejezés), a továbbiakban az exponenciális illesztésből származó értékeket fogjuk használni. A linearizálással ugyanis nagyobb koncentrációk — és alacsonyabb hőmérsékletek — esetén nem tisztán a két-szennyező—vakanciahármassokhoz tartozó faktorokat, hanem a magasabb komplexek hatását is tartalmazó effektív együtthatókat határoznánk meg. Ez a lineáris koncentrációfüggést leíró elméleti modellekkel való összevetéshez, a fentebb említett három alacsonyhőmérsékleti AlZn ötvözetben kapott értéket leszámítva, még abból a szempontból sem lesz zavaró, hogy az összes többi ötvözetben valamennyi hőmérsékleten a lineáris és az exponenciális illesztésből kapott együtthatók hibahatáron belül megegyeztek ($\beta_i^{\text{Zn}} \simeq b_i^{\text{Zn}}$).

A diffúziós együtthatók koncentrációfüggését jellemző β^{Zn} együtthatók értékeit és ezek hibáját tartalmazzák a 17., ..., 24. táblázatok. A táblázatok alján e mennyiségek hibáikkal súlyozott átlagértéke, illetve ezek hibái [113] láthatók. Az AlFeZn és AlCuZn ötvözetekben a β^{Zn} értékek hibáit nem számoltuk ki, minthogy csak két cink koncentrációnál mértünk; a 19. és 23. táblázat adatai így csak tájékoztató jellegűek és az átlagok is egyszerű számtani közepek.

Az eredmények alapján a következő általános következtetéseket vonhatjuk le:

a) A Zn , Mg , Cu és Si ötvöző atomok gyorsítják a ^{65}Zn diffúziós együtthatóját. A koncentrációfüggést a (30) összefüggéssel jellemeztük, és három esetet (AlZn ötvözetekben a három legalacsonyabb hőmérsékleten kapott érték) leszámítva, a (30) exponenciális és a (29) lineáris összefüggésben szereplő együtthatók hibahatáron belül megegyeztek ($\beta_i^{\text{Zn}} \simeq b_i^{\text{Zn}}$). A vas és az ittrium hatását — elsősorban a szilárdoldatba vihető kis koncentrációk miatt — nem tudtuk kimutatni.

b) A 16., ..., 24. táblázatok szerint a különböző ötvözők és a cink ^{65}Zn diffúzióját gyorsító hatása a vizsgált hőmérséklet és koncentráció tartományban additív és a gyorsító hatás a Mg -tól a Zn -en és a Cu -en keresztül a Si -ig haladva növekszik.

17. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós együtthatójának a Mg koncentrációtól való függését jellemző együtthatók AlMg és AlZnMg ötvözetekben

T (K)	$\beta_{\text{Mg}}^{\text{Zn}}$			
	0 at % Zn	0,71 at % Zn	1,5 at % Zn	2,1 at % Zn
848,2	$5,2 \pm 2,4$	$6,5 \pm 1,8$	$4,6 \pm 0,7$	$4,2 \pm 2,2$
808,4	$5,5 \pm 0,9$	$3,4 \pm 2,5$	$5,5 \pm 0,3$	$3,6 \pm 0,1$
783,0	$6,2 \pm 0,8$	$3,7 \pm 3,9$	$1,9 \pm 2,2$	$4,5 \pm 1,2$
759,7	$6,5 \pm 1,2$	$6,4 \pm 2,8$	$0,5 \pm 2,5$	$3,8 \pm 1,0$
727,7	$7,2 \pm 1,5$	$4,8 \pm 1,0$	$2,1 \pm 0,2$	$8,1 \pm 2,9$
696,0	$7,1 \pm 0,9$	$6,0 \pm 0,1$	$5,6 \pm 1,0$	$5,4 \pm 0,9$
Átlag	$6,3 \pm 0,1$	$6,2 \pm 0,1$	$3,3 \pm 0,2$	$3,6 \pm 0,1$
Összes átlag	$4,8 \pm 0,1$			

18. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós együtthatójának a Zn koncentrációtól való függését jellemző együtthatók AlZnMg ötvözetekben

T (K)	$\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$	
	1,1 at % Mg	2,8 at % Mg
883,1	$12,2 \pm 3,6$	
848,2	$8,1 \pm 0,5$	$8,4 \pm 2,4$
844,1	$11,9 \pm 1,6$	
808,4	$7,0 \pm 1,3$	$11,6 \pm 1,8$
795,5	$12,2 \pm 6,4$	
783,0	$6,4 \pm 4,7$	$10,5 \pm 2,6$
759,7	$10,9 \pm 2,9$	$9,2 \pm 4,0$
745,6	$11,4 \pm 1,4$	
727,7	$12,3 \pm 1,2$	$14,8 \pm 4,2$
696,0	$13,1 \pm 0,3$	$14,8 \pm 2,1$
Átlag	$11,6 \pm 0,3$	$11,2 \pm 0,3$
Összes átlag	$11,4 \pm 0,3$	

19. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós együtthatójának a Zn koncentrációtól való függését jellemző együtthatók AlZnFe ötvözetekben

T (K)	$\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$		
	0 at % Fe	0,005 at % Fe	0,02 at % Fe
882,6	8,6	-14,5	-6,0
835,8	56,5	0,0	17,2
783,7	6,1	14,8	32,0
732,6	0,9	-0,9	16,9
Átlag	18,0	-0,2	15,0
Összes átlag	11,0		

c) A b_i^{Zn} együtthatók AlZn ötvözetekben gyenge hőmérsékletfüggést mutatnak; csökkenő hőmérséklettel értékük növekszik. A többi ötvözetben a vizsgált hőmérséklettartományban az általunk elért mérési pontosság mellett ezek az együtthatók a hőmérséklettől gyakorlatilag függetlennek tekinthetők.

d) Valamennyi összetételnél a diffúziós együtthatók követik az Arrhenius-törvényt. Megállapítottuk, hogy tiszta alumíniumban a KLTE Alkalmazott Fizikai Tanszékén eddig mért ^{65}Zn diffúziós együtthatók az Arrhenius-törvény szerint függenek a hőmérséklettől, és a jellemző diffúziós paraméterek értékei a következők: $Q = (1,239 \pm 0,009) \text{ eV}$, $D_0 = (0,245 \pm 0,033) \text{ cm}^2/\text{s}$.

e) Bár a c) pont szerinti hőmérsékletfüggésből következne, hogy az aktivációs entalpiáknak és a preexponenciális faktoroknak gyengén kellene függnie a koncentrációtól, ez a hatás általában a kísérleti hibákon belül van, nem lehet kimutatni.

20. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn diffúziós együtthatójának a Si koncentrációtól való függését jellemző együtthatók
AlSi és AlZnSi ötvözetekben

T (K)	β_{Zn}^{Zn}		
	0 at % Zn	1,48 at % Zn	2,13 at % Zn
836,3	62 ± 23	15 ± 32	5 ± 33
794,7	-1 ± 13	4 ± 6	62 ± 17
753,0	42 ± 19	39 ± 14	6 ± 18
716,9	64 ± 33	-1 ± 30	30 ± 7
673,6	16 ± 16	-11 ± 30	-4 ± 34
Átlag	23 ± 8	9 ± 6	30 ± 6
Összes átlag	19 ± 4		

21. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn diffúziós együtthatójának a Zn koncentrációtól való függését jellemző együtthatók
AlZnSi ötvözetekben

T (K)	β_{Zn}^{Zn}				
	0 at % Si	0,05 at % Si	0,10 at % Si	0,15 at % Si	0,20 at % Si
836,6	6,9 ± 1,1	7,3 ± 2,8	10,1 ± 3,6	8,3 ± 2,9	0,7 ± 1,2
794,7	6,6 ± 2,9	8,1 ± 0,3	9,0 ± 1,8	10,7 ± 1,6	11,9 ± 1,3
753,0	6,2 ± 1,3	5,4 ± 1,3	8,9 ± 1,1	4,8 ± 1,4	3,0 ± 1,6
716,9	4,8 ± 0,3	6,5 ± 2,4	6,7 ± 2,2	4,1 ± 3,8	0,6 ± 1,9
673,6	10,0 ± 5,5	9,4 ± 5,8	12,2 ± 1,0	9,0 ± 1,7	7,5 ± 0,1
Átlag	5,0 ± 1,3	7,9 ± 0,3	10,1 ± 0,7	7,7 ± 0,9	7,4 ± 0,1
Összes átlag	7,5 ± 0,1				

22. TÁBLÁZAT

⁶⁵Zn diffúziós együtthatójának a Cu koncentrációtól való függését
jellemző együtthatók AlCu és AlZnCu ötvözetekben

T (K)	β_{Cu}^{Zn}	
	0 at % Zn	2,04 at % Zn
853,9	6,1 ± 8,6	10,7 ± 2,8
843,4	16,0 ± 3,2	12,2 ± 3,9
813,2	15,4 ± 2,4	11,1 ± 2,1
779,7	15,9 ± 3,4	13,0 ± 2,0
754,0	-0,9 ± 4,6	10,0 ± 3,2
714,1	4,3 ± 9,7	12,9 ± 4,9
Átlag	13,3 ± 1,6	11,7 ± 1,1
Összes átlag	12,2 ± 0,9	

23. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós együtthatójának a Zn koncentrációtól való függését jellemző együtthatók
AlZnCu ötvözetekben

T (K)	$\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$				
	0 at % Cu	0,69 at % Cu	1,23 at % Cu	1,57 at % Cu	1,86 at % Cu
893,2	4,3				
853,9	6,9	1,5	13,0	7,0	
843,2	7,2	10,5	0,0	2,6	8,0
813,2	11,5	10,1	9,2	7,7	7,7
779,7	12,3	8,7	3,2	9,5	10,3
754,0	3,1	11,4	15,0	10,0	
714,1	9,1	2,9	13,0		
Átlag	7,8	15,0	8,9	7,4	8,7
Összes átlag	9,6				

24. TÁBLÁZAT

^{65}Zn diffúziós együtthatójának a Zn koncentrációtól való függését jellemző együtthatók
AlZnY ötvözetekben

T (K)	$\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$		
	0 at % Y	0,021 at % Y	0,045 at % Y
855,7	8,2 ± 2,2	8,1 ± 0,3	9,1 ± 0,9
779,4	8,9 ± 0,7	10,4 ± 0,8	10,7 ± 1,1
Összes átlag	8,6 ± 0,3		

Egyedül az AlZn ötvözetekben (ahol a legnagyobb koncentrációig és a legalacsonyabb hőmérsékletekig mértünk) látható az aktivációs energiákban egy, a fenti várakozásnak megfelelő tendencia.

Az eredményeket más szerzők adataival összevetve a következő megállapítások tehetők:

a) Cink diffúziójára tiszta alumíniumban kapott Q és D_0 értékek igen jól egyeznek az 1. táblázat utolsó négy adatával. Legjobb az egyezés az irodalomban legmegbízhatóbbnak tartott Peterson és Rothmann [45] által közölt eredménnyel.

b) A cink diffúziós együtthatójának koncentrációfüggésére vonatkozó szisztematikus vizsgálatokat — mint már említettük — híg AlZn ötvözetekben eddig nem végeztek. A 2. táblázatban levő adatok közül a [72]-ből származó eredményről ugyanazt a kritikai megjegyzést lehet tenni, mint a 3.1. fejezetben. Ugyanakkor a [70] és [73] eredményekkel az egyezés kitűnő. [70]-ben, illetve [114]-ben a cink diffúziós együtthatójának koncentrációfüggését koncentrált AlZn ötvözetekben vizsgálták. Az ott kapott adatokból 773 K-on felrajzolva a $\ln D \sim c$ függvényt, ennek kezdeti meredekségéből 9 (1/at. tört) [114], illetve 9,5 (1/at. tört) [70] adódik, ami kitűnően egyezik az 5. táblázat megfelelő adataival.

c) Háromalkotós ötvözetekben eddig csak egy összetételnél kapott, a 2. táblázatban mutatott, [75]-ből származó kísérleti eredmény ismeretes, amelynek az egyezése az ehhez közeli összetételű MZ—25-ös mintán általunk meghatározott Q és D_0 értékekkel szintén megfelelő.

III. AZ EREDMÉNYEK ÉRTELMEZÉSE

5. MIKROSZKOPIKUS MODELLEK

5.1. Szennyező-diffúzió tiszta alumíniumban

A 2.3.2. fejezetben megállapítottuk, hogy alumíniumban a Le Claire-modell alapján a (39) aszimptotikus potenciál alak különböző változatait felhasználó számítások [45, ..., 49] közül a Hood és Schultz [48], valamint Anand és Agarwala [49] eredményei meglepően jól egyeztek a kísérleti adatokkal. Az egyezés nem átmeneti fém szennyezőkre két ok miatt volt meglepő:

- a) Az aszimptotikus alak használata a legközelebbi szomszédos hely környezetében már durva közelítésnek tekinthető.
- b) Az A és δ paraméterek (lásd 2.3.1. fejezet) meghatározására szolgáló eljárások nem egyértelműek. Általában adott fázistolás rendszerhez négy A és δ megoldás tartozik és közülük legfeljebb a kísérlettel való egyezés alapján lehet választani. Erről az idézett cikkben nem esik szó, sőt azt sem vizsgálták, hogy a fázistolások kiszámolásakor a kísérleti maradékellenállás értékek közötti eltérések mennyire befolyásolják az eredményeket.

A felvetett problémák tisztázása céljából számításokat végeztünk nem átmeneti fém szennyezőkre alumíniumban [115]. A számításokban a (39) aszimptotikus potenciál alakokat használtuk a Kohn—Vosko- [32], vagy az Alfred—van Ostenburg- [37] módszerrel — a Blatt-korrektciót is figyelembe véve — meghatározott A és δ értékek alapján. Három szennyezőre (Zn, Mg, Cu) a (43) preaszimptotikus alak segítségével is számoltunk. Ekkor a B és ξ mennyiségeket az Alfred—van Ostenburg által adott eljárásból [116], illetve egy ehhez hasonló módszerrel határoztuk meg [115].

A felhasznált fázistolás értékeket az A , δ , B és ξ mennyiségeket, valamint ezek eredetére utaló hivatkozásokat a 25. táblázat tartalmazza. Az aszimptotikus, illetve preaszimptotikus alak felhasználásával kapott eredményeket és a kísérleti értékeket pedig a 26. és 27. táblázatok tartalmazzák. (A 26. és 27. táblázat első oszlopában levő hivatkozások a 25. táblázatból vett paraméterekre utalnak.) Sajnos, alkalmas alumínium tracer hiánya miatt, az alumínium öndiffúziós paramétereit nem határozták meg eddig olyan precízen, mint más fémekben. Ezért a 26. táblázatban két kísérleti ΔQ_{exp} oszlop szerepel, amelyek az irodalomban leginkább elfogadott két $Q_{\text{on}}^{(1)} = 1,31$ (eV) [119] és $Q_{\text{on}}^{(2)} = 1,26$ (eV) [45] adatnak felel meg.

A Le Claire-modellben a C értéke függ D_0 -tól és D_{0i} -től is. Minthogy a fenti aktivációs entalpiákhoz tartozó $D_0^{(1)} = 0,18$ (cm²/s) és $D_0^{(2)} = 0,11$ (cm²/s) preexponenciális faktor értékek hibahatáron belül megegyeznek, és erre a kis eltérésre a ΔQ értékek nem érzékenyek, a számításokban mindenütt a $D_0 = 0,11$ (cm²/s) értéket használtuk. Hasonló okok miatt a D_{0i} értékére a [120] és [121] összefoglaló

25. TÁBLÁZAT

A szennyezők fázistolásai és az ebből számolt aszimptotikus és a preaszimptotikus potenciálokat meghatározó paraméterek (A , δ , illetve B , ξ)

Szennyező	η_0	η_1	η_2	η_3	A	δ	B	ξ
Mg [50, 117]	-2,4030	-0,0780	—	—	0,0262	2,1200	0,0786	3,6500
Mg [51]	-2,4500	-0,0300	—	—	0,0324	-2,4500	—	—
Mg [118, 117]	-2,2850	-0,0790	-0,0210	-0,0016	0,0436	0,5370	0,0861	3,8110
Mg [118]	-2,2850	-0,0790	-0,0210	-0,0016	0,0431	0,5370	0,3500	3,3840
Mg [118]	-2,2850	-0,0790	-0,0210	-0,0016	0,0428	0,7160	—	—
Mg [118]	-2,4149	-0,0502	-0,0153	—	0,0370	0,6370	—	—
Cu [38]	-2,0300	0,0100	—	—	0,0450	1,1500	—	—
Cu [118]	-2,0436	0,0109	0,0029	0,0002	0,0446	1,1180	0,1700	3,7850
Cu [118, 117]	-2,0436	0,0109	0,0029	0,0002	0,0446	1,1180	0,0522	3,6560
Zn [50, 117]	-0,7150	-0,2280	—	—	0,0162	2,1100	0,1210	4,5280
Zn [118]	-0,5344	-0,1969	-0,0522	-0,0039	0,0162	2,1100	0,2920	0,3750
Zn [118, 117]	-0,5344	-0,1969	-0,0522	-0,0039	0,0162	2,1100	0,1030	4,5460
Zn [51]	-0,5000	-0,3000	—	—	0,0212	0,0000	—	—
Zn [118]	-0,5344	-0,1969	-0,0522	-0,0039	0,0094	-1,0270	—	—
Ag [49]	-2,5800	-0,1860	—	—	0,0504	0,1800	—	—
Ag [118]	-1,4750	-0,3430	-0,0260	0,0000	0,0460	0,8600	—	—
Ge [49]	-0,3800	0,4800	—	—	0,0837	0,3100	—	—
Si [118]	1,0249	0,1996	0,0529	0,0040	0,0321	1,4120	—	—
Si [118]	2,1234	-0,0460	-0,0123	-0,0009	0,0408	-1,1030	—	—
Ga [117]	-0,5000	0,0200	—	—	0,0256	2,6700	—	—

26. TÁBLÁZAT

A 25. táblázat adatai alapján az aszimptotikus potenciál alakból számolt ΔQ értékek, valamint a kísérleti eredmények

	D_{0i} (cm ² /s)	$-\Delta H_{vi}$ (eV)	C (eV)	ΔQ (eV)	ΔQ_{exp}^1 (eV)	ΔQ_{exp}^2 (eV)
Mg [50]	0,118 [119]	0,046	0,000	0,140	-0,067	-0,016
Mg [51]	0,118	0,015	0,000	0,045		
Mg [118]	0,118	-0,031	-0,050	-0,047		
Mg [118]	0,118	-0,017	-0,100	0,046		
Mg [118]	0,118	-0,020	-0,010	-0,053	-0,067	-0,017
Cu [38]	0,15 [119]	0,018	0,010	0,045		
Cu [118]	0,15	0,015	0,010	0,037		
Zn [50]	0,26 [45]	0,028	0,000	0,086		
Zn [51]	0,26	-0,032	-0,250	0,151	0,010 [71]	0,060 [71]
Zn [118]	0,26	-0,016	-0,030	-0,020	-0,060 [74]	-0,010 [74]
Ag [49]	0,118 [45]	-0,065	-0,130	-0,069	-0,093	-0,043
Ag [118]	0,118	-0,006	-0,010	-0,010	-0,075	-0,025
Ge [49]	0,48 [45]	-0,092	-0,250	-0,033	-0,050	0,000
Si [118]	0,90 [121]	0,028	0,000	0,085	0,038	0,088
Si [118]	0,90	-0,068	0,240	0,030	-0,039	0,011
Ga [117]	0,49 [45]	0,047	0,000	0,146		

27. TÁBLÁZAT

A 25. táblázat adatai alapján a preaszimptotikus potenciál alakból számolt ΔQ értékek

	$-\Delta H_{vi}$ (eV)	C (eV)	ΔQ (eV)
Mg [50]	0,050	0,000	0,157
Mg [118, 117]	0,016	0,000	0,118
Mg [118]	-0,053	-0,150	-0,045
Zn [118]	-0,030	-0,160	-0,016
Zn [118, 117]	0,007	0,000	-0,007
Zn [50, 117]	0,005	-0,005	-0,012
Cu [118]	-0,004	-0,030	0,006
Cu [118, 117]	-0,010	-0,060	-0,007

cikkekben szereplő kísérleti értékek közül a legmegbízhatóbbakat igyekeztünk kiválasztani és C meghatározásához csak ezt használtuk. C értékét az (50) egyenlet alapján grafikusan számoltuk ki, míg a számolások többi részét a 2.3. fejezetben szereplő képletek alapján az egyetem ODRA 1013 számológépén végeztük (feltételeztük, hogy $k_F=0,93$ ate).

A 26. táblázat hatodik és hetedik oszlopában szereplő kísérleti értékek pontos eredetét nem tüntettük fel, valamennyi megtalálható a [120, 121, 122] összefoglaló munkákban. Kivételt — érthető módon — csak a cinkre vonatkozó eredményeknél tettünk, itt pontosan feltüntettük a hivatkozásokat.

A fenti megjegyzések után a 26. és 27. táblázatok alapján a következő megállapításokat tehetjük. Az ugyanolyan potenciálalakok használatából származó eltérések azonos nagyságrendűek, mint a kísérleti eredmények hibája és annyi különböző eredmény adódik ugyanarra a szennyezőre, ahány forrásból származó fázistolás rendszer (azaz A, δ és esetleg B, ξ) van. Ez arra utal, hogy a szennyezők körüli árnyékolást a (11/16) a távolságon kívül (lásd a számolásban használt (44), ..., (50) képleteket) alumíniumban az oszcilláló potenciálok nagyságrendileg helyesen írják le, de az árnyékoló potenciál pontos menetét jelenleg nem tudjuk az elméletből egyértelműen megadni.

A 2.3.2. fejezetben már említett pszeudopotenciál módszert alkalmazó becsléseket [52, 54] eddig a Zn, Mg és Cd esetére végezték el [52] és a kísérlettel való egyezést tekintve hasonló következtetéseket lehet levonni, mint az előző eljárásoknál. Figyelembe véve továbbá, hogy ezek a módszerek nagyon érzékenyek a pszeudopotenciál és a dielektromos függvény megválasztására [41, 42] megállapíthatjuk, hogy valamennyi eddig ismeretes mikroszkopikus modell — függetlenül attól, hogy a nyereg-ponti állapot energiáját a Le Claire-modell szerint vagy másként becsüli meg — inkább csak nagyságrendileg helyes becsléseket szolgáltat és a kölcsönhatások finomabb részleteit még nem tudja leírni.

A ^{65}Zn diffúziójával kapcsolatban mondhatjuk, hogy a fenti általános megállapítások ezekre a részeredményekre is igazak. Az eddigiekhez annyit tehetünk még hozzá, hogy a 3. táblázat szerint a $-\Delta H_{vi}=B_{vi}$ értéke pozitív és így a 26. és 27. táblázatokban csak két olyan (preaszimptotikus) potenciál van, amely a kísérleti kötési energia és a ΔQ mennyiségeket előjelben is helyesen adja vissza.

Végül megjegyezzük, hogy az átmeneti fémek alumíniumban való diffúziós paramétereinek értelmezése — amelyre itt nem térünk ki részletesen — a nem átme-

neti fémek problémájánál jóval kevésbé tisztázott kérdés. Az eddigi kísérleti tények alapján nem világos ugyanis, hogy ezek a szennyezők egyszeres vakancia mechanizmussal diffundálnak-e, vagy már egészen kis tracer koncentrációknál a több szennyezőből álló komplexeknek a szerepe is jelentős [123].

5.2. Öndiffúzió híg alumínium ötvözetekben

A 25. táblázatban szereplő A és δ értékek segítségével az aszimptotikus potenciál alakok felhasználásával az (51) (feltételezve, hogy $f_1 = f_2 = f_0$) és az (56) összefüggések alapján (Lidiard-, illetve Santoro-modell) számításokat végeztünk ($T = 773$ K-on) a b értékekre. Az eredményeket a 28. táblázat tartalmazza, amelynek utolsó oszlopában a 2.2. fejezetben mondottak alapján csak annyit tüntettünk fel, hogy a b 0 és 10 közé esik 773 K-on. Az első oszlopban az elemek sorrendje pedig azt a valószínűségi sorrendet tükrözi [102], amely szerint a Zn a leggyengébben, a Cu pedig a legerősebben befolyásolja az öndiffúziós együtthatót. Az (56) formulában szereplő összegzést 150 koordinációs héjig végeztük el az egyetem ODRA 1013 számológépe segítségével.

A két modellből származó eredmények azonos nagyságrendűek, de ugyanazt a potenciált véve gyakran előjelben is eltérnek. Az egy szennyezőre vonatkozó különböző A és δ felhasználásából származó eltérések azonban olyan nagyok, hogy a csak LSZK-okat tartalmazó Lidiard-modell és a szennyező közvetlen környezetében kevésbé precíz, de a távoli kölcsönhatásokat is figyelembe vevő Santoro-modell között a fenti eredmények alapján nem lehet dönteni. Legfeljebb annyi közös vonásuk van, hogy egyikből sem adódnak jobb eredmények mint a másikkól, és a kísérlettel való egyezésük még olyan sincs, mint a számolt ΔQ értékeké a 26. táblázatban.

28. TÁBLÁZAT

A 25. táblázat adatai alapján az aszimptotikus potenciál alakokból számolt öndiffúziós gyorsítási faktorok

	b		b_{exp}
	(LIDIARD)	(SANTORO)	
Zn [50]	+2,54	-0,97	$0 < b^{exp} < 10$
Zn [51]	-3,30	-1,15	
Zn [118]	-1,10	+0,55	
Ag [49]	-1,00	-3,66	
Ag [118]	-5,70	-5,28	
Mg [50]	+4,03	-1,53	
Mg [51]	+5,52	+3,54	
Mg [118]	-2,20	-4,40	
Mg [118]	-2,30	-3,94	
Si [118]	-	-3,53	
Si [118]	-	+2,70	
Cu [38]	+1,50	-	
Cu [118]	+1,34	-5,25	

Megjegyezzük, hogy a Lidiard-modell a koncentrációfüggést teljesen azonos feltételezések alapján írja le, mint a Le Claire-modell a szennyező-diffúziót végtelen hígításban. Minthogy kísérletileg b előjelét jelenleg egyértelműbben el lehet dönteni, mint ΔQ -ét, az öndiffúziós együtthatók koncentrációtól való függésének vizsgálatával sok további hasznos információt lehetne szerezni a szennyezők körüli árnyékoló potenciálokról is.

5.3. Szennyező-diffúzió híg alumínium ötvözetekben

5.3.1. Cink diffúziója AlZn ötvözetekben

Mérési eredményeink értelmezésekor nem sok lehetőség között választhatunk.

A mérhetősekből kiinduló eljárások (lásd pl. [57]) azt a kvalitatív következtetést eredményezik, hogy a rács összehúzódása a diffúziós együttható csökkenését eredményezi. Minthogy AlZn ötvözetekben az egy atomszázalék ötvöző hozzáadásakor bekövetkező relatív rácsparaméterváltozás $-0,016$ [50], a diffúziós együtthatókban kísérletileg megfigyelt növekedés ($b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}} > 0$) ellentmond a fenti modellnek.

A kísérleti eredményeket összevethetjük a Stark által számolt [66] elméleti $b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$ értékekkel. A szennyező gyorsítási faktorok becslésekor Stark a következő három paramétert használta: $X = \exp(\Delta H_{ii}/kT)$, $Y = \exp(\Delta H_{vi}/kT)$ és $Z = \omega_{i1}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$. Eredményeit táblázatokban adta meg (lásd 29. táblázat) és analitikus formulát nem vezetett le. Ha a kísérleti adatokkal való összevetést akarjuk elvégezni, szükségünk van a fenti paraméterek számított vagy elméletileg becsült értékeire. Az X és Y paraméterek értékeit elméleti becslésből vesszük, a $-\Delta H_{ii} = B_{ii}$ kötési energiára ugyanis jelenleg megbízható kísérleti adat nem áll rendelkezésre. A Z értékének elméleti becslésére ugyanakkor eddig az irodalomban nem vállalkoztak, így a kísérleti $b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$ értékek és az X, Y paraméterek alapján Z értékét fogjuk megkeresni és a kapott eredmény realitását próbáljuk ellenőrizni. Takai és társai [40] pseudopotenciál módszerrel, másodrendű perturbációs számítás alapján számolták a SZ—V , SZ—SZ és 2SZ—V komplexek kötési energiáit alumíniumban. A számolásokban a vezetési elektronok kicserélődési és korrelációs effektusainak figyelembevételére a dielektromos függvényben háromféle korrekciót alkalmaztak. Az első közelítésben (az ő jelölésükkel RPA) elhanyagolták a fenti hatásokat, a másodikba (HS) csak a kicserélődési, a harmadikba pedig mindkét fenti effektust belefoglalták (SSTL). Eredményeiket a 30., 31. és a 32. táblázatok tartalmazzák. A 30. táblázatban a SZ—V kötési energiák ($-\Delta H_{vi} = B_{vi}$), a 31. táblázatban a SZ—SZ kötési energiák (B_{ii}), a 32. táblázatban pedig a 2SZ—V komplexek kötési energiái (B_{2iv}) találhatók. Az utóbbi táblázat első sorában az olyan esethez tartozó kötési energiák vannak feltüntetve, amikor a két szennyező egymással is, és a vakanciával is szomszédos, a többi sorban pedig a geometriailag lehetséges további hat különböző konfiguráció kötési energiájának erre az energiára vonatkoztatott értéke szerepel. Érdemes megjegyezni, hogy a 3. táblázat kísérleti adataival való összehasonlítás szerint a HS-közelítés jobb egyezést ad, mint az elvileg helyesebb SSTL.

A fentiek alapján a cink-vakancia és a cink-cink kötési energiára a HS-közelítésből származó értékeket véve (30. és 31. táblázatok) kapjuk: $X = 0,63$ és $Y = 0,83$ $T = 773$ K-on. A 30. táblázatban $X = 1$ és $Y = 1$ esetén $Z = 100$ -nál $b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}} = 5,18$, ami előjelben és nagyságrendben is egyezik a kísérletből kapott értékkel. Mint lát-

29. TÁBLÁZAT

J. Stark [66] eredményei az ötvöző diffúziós együttható koncentrációfüggését jellemző b_i együtthatókra az $X = \exp(\Delta H_{vi}/kT)$, $Y = \exp(\Delta H_{vi}/kT)$ és a $Z = \omega_{i1}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$ paraméterek függvényében

X	Y	$f_i(c=1 \text{ at } \%)$	b_i
$Z=0,01$			
0,1	0,1	0,58	-0,90
	1,0	0,57	1,31
	10,0	0,57	-1,35
1,0	0,1	0,82	-0,88
	1,0	0,82	-0,89
	10,0	0,82	-0,90
10,0	0,1	0,97	-0,83
	1,0	0,97	-0,83
$Z=0,10$			
0,1	0,1	0,58	1,74
	1,0	0,57	-0,96
	10,0	0,57	-1,19
1,0	0,1	0,82	-0,56
	1,0	0,82	-0,80
	10,0	0,82	-0,83
10,0	0,1	0,97	-0,73
	1,0	0,97	-0,75
	10,0	0,97	-0,75
$Z=1,0$			
0,1	0,1	0,49	6,57
	1,0	0,56	0,00
	10,0	0,57	-0,94
1,0	0,1	0,82	2,08
	1,0	0,82	0,00
	10,0	0,82	-0,50
10,0	0,1	0,97	0,21
	1,0	0,97	0,21
	10,0	0,97	-0,11
$Z=10,0$			
0,1	0,1	0,20	11,43
	1,0	0,49	1,09
	10,0	0,55	-1,00
1,0	0,1	0,72	13,60
	1,0	0,77	2,97
	10,0	0,78	-0,18
10,0	0,1	0,96	8,25
	1,0	0,96	5,60
	10,0	0,93	2,37
$Z=100$			
0,1	0,1	0,03	17,63
	1,0	0,19	1,37
	10,0	0,38	-1,03
1,0	0,1	0,28	34,7
	1,0	0,45	5,18
	10,0	0,51	-0,08
10,0	0,1	0,77	67,6
	1,0	0,66	23,3
	10,0	0,56	4,16

30. TÁBLÁZAT

Takai és társai [40] által számolt szennyező—vakancia
kötési energiák az általuk használt három közelítésben

Szennyező	B_{vi} (eV)		
	RPA	HS	SSTL
Cu	−0,263	0,045	0,027
Ag	−0,249	0,045	0,020
Au	−0,263	0,045	0,027
Mg	−0,064	0,042	0,009
Zn	−0,093	0,031	0,007
Hg	−0,150	0,020	0,019
In	0,059	0,018	−0,004
Sn	0,192	−0,003	−0,015
Pb	0,282	0,038	−0,001
Bi	0,460	0,038	−0,004

31. TÁBLÁZAT

Takai és társai [40] által számolt szennyező—szennyező
kötési energiák

Szennyező i		B_{ii} (eV)		
A	B	RPA	HS	SSTL
Cu	Cu	−0,186	0,032	0,027
Ag	Ag	−0,170	0,030	0,015
Au	Au	−0,186	0,032	0,027
Mg	Mg	−0,011	0,010	−0,004
Zn	Zn	−0,023	0,011	0,001
Hg	Hg	−0,056	0,009	0,016
In	In	−0,007	−0,009	−0,004
Sn	Sn	−0,095	−0,017	0,002
Pb	Pb	−0,230	−0,134	−0,084
Bi	Bi	−0,607	−0,275	−0,165
Zn	Mg	−0,015	0,013	0,000
Cu	Sn	0,133	−0,003	−0,017
Cu	Mg	−0,050	0,028	0,006

ható, az eredmény nem érzékeny a két közelítésből (HS és SSTL) az energiákra adódó különbségekre. Meg kell jegyezni, hogy adott X és Y esetén b_{Zn}^{Zn} csak nagyon gyengén függ Z -től és az is elképzelhető, hogy $Z=1000$ esetén az egyezés jobb lenne mint $Z=100$ -ra. A kis kölcsönhatási energiákat figyelembe véve azonban nem nagyon hihető, hogy a SZ—V kicserélődési frekvencia két-három nagyságrenddel nagyobb lenne a 2SZ—V komplexben, mint a SZ—V párban. A Le Claire-modellben például az ugrási frekvenciára gyakorolt hatás közel hasonló, mint amit a szennyező körüli többletpotenciál a szennyező melletti helyen a vakanciakoncentrációra gyakorol. Így az X és Y értékéhez hasonlóan Z -nek várhatóan 1 nagyságrendjébe eső értéknek kell lennie. Meg kell jegyezni végül, hogy a használt B_{ZnV} és B_{ZnZn} értékek elméleti becslésekből származnak és kísérleti bizonyítékok csak B_{ZnV} -re

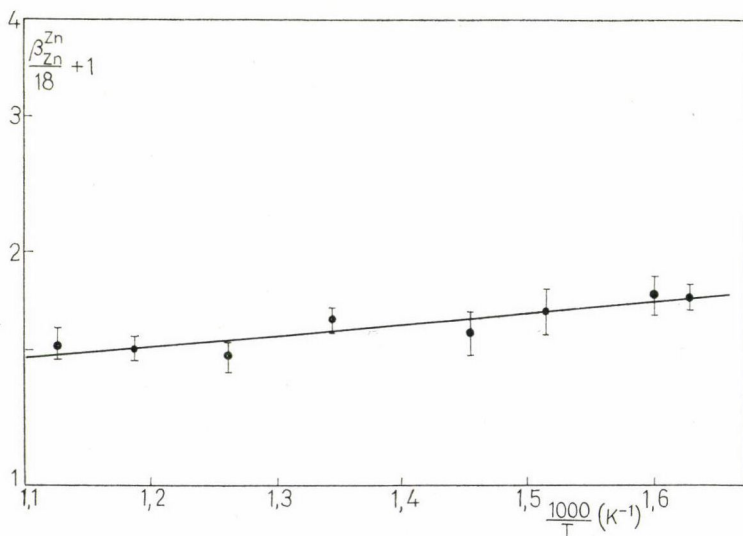
32. TÁBLÁZAT

Takai és társai [40] által számolt két-szennyező—vakancia kötési energiák. (Az első sorban ahhoz a konfigurációhoz tartozó energia látható, amikor a két szennyező egymással is és a vakanciával is szomszédos, a többi sorban pedig a többi lehetséges konfigurációhoz tartozó kötési energiának az elsőre vonatkoztatott értéke szerepel.)

B_{2ZnV}		B_{2MgV}		B_{2CuV}	
HS 0,073 (eV)	SSTL 0,014 (eV)	HS 0,095 (eV)	SSTL 0,095 (eV)	HS 0,048 (eV)	SSTL 0,080 (eV)
0,87	0,98	0,89	1,08	0,88	0,75
0,84	0,92	0,90	1,10	0,74	0,64
0,85	0,94	0,89	1,09	0,74	0,65
0,71	0,83	0,65	0,19	0,83	0,79
0,57	0,43	0,54	0,06	0,63	0,63
0,59	0,58	0,56	0,12	0,63	0,66

vannak. A 29. táblázatból látható, hogy b_{Zn}^{Zn} értéke nagyon érzékeny B_{ZnZn} -re és például, ha $B_{ZnZn}=B_{ZnV}=0,05$ eV, akkor $b_{Zn}^{Zn}=8$, ha $Z=10$.

Kísérleti eredményeinket az (58) analitikus formula alapján is értelmezhetjük. Sőt, a Stark-modellben használt egyszerűsítést figyelembe véve ($Z=\omega_{i1}/\omega_2=\omega_{i3}/\omega_2$) először az egyszerűbb, a $B_{ii}=0$ és $Z=1$ feltételezésből kapott (59) formulát használjuk. A 19. ábra mutatja a $(\beta_{Zn}^{Zn}/18+1)$ logaritmusát az $1/T$ függvényében. Látható, hogy a kapott függvény hibahatáron belül egyenessel közelíthető. A legkisebb négyzetek módszerével illesztett egyenes tengelymetszete — egyezésben azzal, hogy (59) szerint ennek az egyenesnek át kell mennie az $1/T=0$, $(b_{Zn}^{Zn}/18+1)=0$ ponton — hibahatáron belül nulla (értéke 0,04). A meredekségből $B_{ZnV}=0,030$ eV, és



19. ábra. A $\lg \left(\frac{\beta_{Zn}^{Zn}}{18} + 1 \right)$ mennyiség hőmérsékletfüggése AlZn ötvözetekben

grafikus becslésből $\Delta B_{\text{ZnV}} = \pm 0,010$ eV. Bár az (59) formula csak bizonyos finomabb részletek elhanyagolása árán adódott, a kapott — tájékoztató jellegűnek tekintendő — érték egyezése a 3. táblázatban található adatokkal, valamint Takai és társai [40] számolásaiival (30. táblázat) jónak mondható. Minthogy eddig az irodalomban az (59) formulát alumínium ötvözetekben nem használták, érdemes az AlAg, illetve AlCu ötvözetekben rendelkezésre álló Ag, illetve Cu szennyező-diffúziós gyorsítási faktorokat [99, 55] is megvizsgálni. Figyelembe véve a 3. táblázatban szereplő B_{vi} értékeket, 773 K-on $b_{\text{Ag}}^{\text{Ag}} = 3$ ($B_{\text{AgV}} = 0,01$ eV), illetve $b_{\text{Ag}}^{\text{Ag}} = 42$ ($B_{\text{AgV}} = 0,08$ eV) AlAg-ben és $b_{\text{Cu}}^{\text{Cu}} \approx 0$ AlCu ötvözetekben. A kísérleti értékek ezzel szemben: $b_{\text{Ag}}^{\text{Ag}} = 0$ (AlAg) és $b_{\text{Cu}}^{\text{Cu}} \approx 17$ (AlCu). Az egyezés ebben a két esetben tehát nem olyan jó, de — mint ahogy az ezüstre kapott két érték is mutatja — a kísérleti adatok (b_i , illetve B_{vi}) pontatlansága is elég nagy ahhoz, hogy ezt az eltérést okozzák.

Az AlZn ötvözetekben rendelkezésre álló pontosabb adatok birtokában az (58) formulát is megvizsgálhatjuk. Most is a Takai és társai által [40] számolt B_{ZnV} és B_{ZnZn} értékeket használva a

$$b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}} = -6 - 12 \exp\left(\frac{0,011}{kT}\right) + Z \left[4 \exp\left(\frac{0,011}{kT}\right) + 14 \right] \exp\left(\frac{0,031}{kT}\right)$$

alapján 773 K-on $b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}} = 11$, ha $Z = 1,04$. Ez az eredmény teljesen összhangban van azzal a Stark-modellnél már említett képpel, hogy ha X és Y értéke közel van egyhez, várhatóan Z is ilyen nagyságrendű kell, hogy legyen. Az így kapott eredményt érdemes összevetni az (59)-ből a $B_{\text{ZnV}} = 0,031$ eV [40] alapján számolt $b_{\text{Zn}}^{\text{Zn}} = 10,7$ értékkel. Látható, hogy az (59) formula ebben az esetben (amikor tehát a kölcsönhatási energiák kicsik) lényegében ugyanazt az eredményt adja mint (58).

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy a Stark-modellből az a fizikailag nehezen elfogadható eredmény adódik, hogy bár a SZ—V és a SZ—SZ kölcsönhatási energiák kicsik (10^{-2} eV nagyságrendűek) a SZ—V kicserélődési frekvenciák két nagyságrenddel nagyobbak mint a cink-vakancia párban. Ugyanakkor az (58) formula alapján realisabb eredmény adódik ($Z \approx 1$ a fenti esetre), sőt az általunk vizsgált rendszerben az (59) formula is igen jól használható.















5.3.2. Cink diffúziója háromalkotós alumínium ötvözetekben

A fenti következtetések alapján háromalkotós ötvözetre (t tracer diffúziója híg Al ötvözetben) vonatkozó eredmények értelmezését az (58), illetve az (59) formulák általánosítása révén lehet megpróbálni. A gyorsító hatás kísérletileg megfigyelt additivitása kvalitatíve is könnyen értelmezhető; mindaddig, amíg az ötvözet elég híg és a két-szennyező—vakancia komplexek „hatástartományai” nem lapolnak át (lásd 2.3.3. fejezetet, illetve [58]-at) a gyorsító hatás additív lesz.

Mielőtt az (58) általánosítását vizsgálnánk, érdemes az előző fejezetben (59) alapján kiszámolt közelítő B_{ZnV} értéket — az additivitás alapján — valamennyi ötvözetben a Zn gyorsító hatására kapott adatok felhasználásával újra kiszámolni. Az így kapott érték $B_{\text{ZnV}} = (0,025 \pm 0,010)$ eV, amely hibahatáron belül megegyezik a csak AlZn ötvözetekből számolt energiával.

Ha nem élünk az (59) szerinti erős egyszerűsítésekkel, akkor az (59) általánosítására van szükség. Arra az esetre, amikor a tracer megegyezett az ötvözővel, Le

Claire [64] Warburton módszerével [20] kiszámolta a szükséges hibakonfigurációk koncentrációját. Eredményeit a 20. ábra tartalmazza. A konfigurációk a második oszlopban, a megfelelő koncentrációk és ugrási frekvenciák pedig a harmadik és negyedik oszlopban találhatóak. Az ötvöző időegység alatt végzett összes ugrásainak a számát a harmadik és negyedik oszlop szorzatainak összege adja. (Az eredményt beosztva a szennyező koncentrációval és felhasználva az (57) összefüggést, adódott (58) [64]-ben.) Az általánosításhoz ugyanezen konfigurációk koncentrációjának ismeretére van szükség azzal a különbséggel, hogy most a $t-V$, $t-SZ-V$ komplexek-

1		$c \left(1 - 12 c \cdot c_{10} \exp \left(\frac{B_{tV}}{kT} \right) - 12 c \cdot \exp \left(\frac{B_{tt}}{kT} \right) - 42 c \right) \cdot 0 \cdot (c \cdot c_{10})$	—
2		$12 c \cdot c_{10} \exp \left(\frac{B_{tV}}{kT} \right) \left[1 - 12 c \cdot \exp \left(\frac{B_{tt}}{kT} \right) - 41 c \right]$	ω_2
3		$6 c^2 \cdot \exp \left(\frac{B_{tt}}{kT} \right)$	—
4		$24 c^2 c_{10} \cdot \exp \left[(2 B_{tV} + B_{tt}) / kT \right]$	$2 \omega_{i1}$
5		$84 c^2 c_{10} \cdot \exp \left[(B_{tV} + B_{tt}) / kT \right]$	ω_{i4}
6		$3 c^2$	—
7		$12 c^2 c_{10} \cdot \exp (2 \cdot B_{tV} / kT)$	$2 \omega_{i3}$
8		$48 c^2 c_{10} \cdot \exp (B_{tV} / kT)$	ω_2
9		$12 c^2$	—
10		$24 c^2 c_{10} \cdot \exp (2 B_{tV} / kT)$	$2 \omega_{i3}$
11		$240 c^2 c_{10} \exp (B_{tV} / kT)$	ω_2
12		$6 c^2$	—
13		$6 c^2 c_{10} \cdot \exp (2 B_{tV} / kT)$	$2 \omega_{i3}$
14		$132 c^2 c_{10} \cdot \exp (B_{tV} / kT)$	ω_2

○ vakancia ● ötvöző atom • matrix atom

20. ábra. A_i becsléséhez szükséges hibakonfigurációk koncentrációja és a megfelelő ugrási frekvenciák

nek kell szerepelni a harmadik oszlopban (itt t a diffundáló tracerre utal). A 3.-tól a 14.-ig a konfigurációk koncentrációját egyszerűen úgy kaphatjuk, hogy a bal oldalon álló szennyezőt mint origót változatlanul hagyva a másik szennyezőt tracer atomra cseréljük ki, és a koncentrációkra vonatkozó képletekben c^2 helyett $c \cdot c_t$ szorzat szerepel (ahol c_t a tracer atomok koncentrációját jelöli) és a megfelelő kötési energiák is értelemszerűen változnak. A 2. konfiguráció helyett a t —V párok koncentrációjára van szükség. Kis tracer koncentrációkra ($c_t \ll c$) a vakanciákat, valamint tracer és ötvöző atomokat tartalmazó rendszerben [64]-hez hasonlóan a koncentrációkban elsőrendig és csak a $c \cdot c_t$ tagokban másodrendig végzett számolásokból könnyen belátható, hogy a t —V párok koncentrációját a

$$12c_t \cdot c_{10} \cdot \exp\left(\frac{B_{tv}}{kT}\right) \left[1 - 12c \cdot \exp\left(\frac{B_{ti}}{kT}\right) - 41c\right]$$

összefüggés adja meg. Ezek után képezve a kapott koncentrációk és frekvenciák szorzatainak összegét, beosztva c_t -vel és felhasználva az (57)-tel analóg

$$\omega_{i4} = \omega_{i3} \exp\left(\frac{B_{iv} - B_{ti}}{kT}\right) \quad (61)$$

összefüggést a tracer diffúzió gyorsítási faktorára a

$$b_i^t = -6 - 12 \exp\left(\frac{B_{ti}}{kT}\right) + \left[\frac{4\omega_{i1}}{\omega_2} \exp\left(\frac{B_{ti}}{kT}\right) + 14 \frac{\omega_{i3}}{\omega_2}\right] \exp\left(\frac{B_{iv}}{kT}\right) \quad (62)$$

kifejezés adódik. Látható, hogy ha a tracer atom megegyezik az ötvözővel az (58) képletre jutunk, azzal a különbséggel, hogy most $b_i \equiv b_i^t$ és az energiák indexében i helyett mindenütt t szerepel.

A kísérleti adatok értelmezéséhez tételezzük fel, hogy $\omega_{i1}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$ és vezessük be a $Z_i = \omega_{i1}/\omega_2$ jelölést. Ennek alapján (62)-ből:

$$b_i^t = -6 - 12 \exp\left(\frac{B_{ti}}{kT}\right) + Z_i \left[4 \exp\left(\frac{B_{ti} + B_{vi}}{kT}\right) + 14 \exp\left(\frac{B_{vi}}{kT}\right)\right]. \quad (63)$$

Bevezetve az $X_{it} = \exp(B_{it}/kT)$ és az $Y_{iv} = \exp(B_{vi}/kT)$ jelöléseket, (63)-at a

$$b_i^t = -6 - 12X_{it} + Z_i(4X_{it} + 14)Y_{iv} \quad (64)$$

alakba írhatjuk át. Sajnos még így is három ismeretlen mennyiség Z_i , X_{it} és Y_{iv} szerepel az egyenletben, ezért célszerű b_i^t értékét e paraméterek szerint kiszámolva megadni. Figyelembe véve, hogy a B_{vi} és a B_{ti} kötési energiák néhányszor 10^{-2} eV nagyságrendűek, a 33. táblázatban X_{it} és Y_{vi} értékeit 0,25 és 4,0 között változtattuk. Ha a 3. táblázat adatait használjuk Y_{iv} becslésekor (azaz Y_{iv} értéke 1 és 2 közé esik), akkor látható, hogy a $\beta_{i^n}^{Z_n}$ kísérleti eredményekből következően

$$0,5 < Z_i < 2,0 \quad (65)$$

a vizsgált hőmérsékleteken valamennyi eddig vizsgált alumínium ötvözetben, azaz az ötvöző atom környezetében a tracer ugrási frekvenciái kettes faktornál gyengébben változnak.

33. TÁBLÁZAT

b_i^t értékei a $Z_i = \omega_{i1}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$, $x_{it} = \exp(B_{it}/kT)$ és az $Y_{iv} = \exp(B_{iv}/kT)$ paraméterek függvényében

Z_i	Y_{iv}	x_{it}							
		0,25	0,50	1,00	1,50	2,00	3,00	4,00	5,00
0,25	0,25	-8,1	-11,0	-16,9	-22,8	-28,6	-40,4	-52,1	-63,9
	0,50	-7,1	-10,0	-15,8	-21,5	-27,3	-38,8	-50,3	-61,8
	1,00	-5,3	-8,0	-13,5	-19,0	-24,5	-35,5	-46,5	-57,5
	1,50	-3,4	-6,0	-11,3	-16,5	-21,8	-32,3	-42,8	-53,3
	2,00	-1,5	-4,0	-9,0	-14,0	-19,0	-29,0	-39,0	-49,0
	3,00	2,3	0,0	-4,5	-9,0	-13,5	-22,5	-31,5	-40,5
	4,00	6,0	4,0	0,0	-4,0	-8,0	-16,0	-24,0	-32,0
	5,00	9,8	8,0	4,5	1,0	-2,5	-9,5	-16,5	-23,5
0,50	0,25	-7,1	-10,0	-15,8	-21,5	-27,3	-38,8	-50,3	-61,8
	0,50	-5,3	-8,0	-13,5	-19,0	-24,5	-35,5	-46,5	-57,5
	1,00	-1,5	-4,0	-9,0	-14,0	-19,0	-29,0	-39,0	-49,0
	1,50	2,3	0,0	-4,5	-9,0	-13,5	-22,5	-31,5	-40,5
	2,00	6,0	4,0	0,0	-4,0	-8,0	-16,0	-24,0	-32,0
	3,00	13,5	12,0	9,0	6,0	3,0	-3,0	-9,0	-15,0
	4,00	21,0	20,0	18,0	16,0	14,0	10,0	6,0	2,0
	5,00	28,0	28,0	27,0	26,0	25,0	23,0	21,0	19,0
0,75	0,25	-6,2	-9,0	-14,6	-20,3	-25,9	-37,1	-48,4	-59,6
	0,50	-3,4	-6,0	-11,3	-16,5	-21,8	-32,3	-42,8	-53,3
	1,00	2,3	0,0	-4,5	-9,0	-13,5	-22,5	-31,5	-40,5
	1,50	7,8	6,0	2,3	-1,5	-5,3	-12,8	-20,3	-27,8
	2,00	13,5	12,0	9,0	6,0	3,0	-3,0	-9,0	-15,0
	3,00	24,0	24,0	22,5	21,0	19,5	16,5	13,5	10,5
	4,00	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0
	5,00	47,3	48,0	49,5	51,0	52,5	55,5	58,5	61,5
1,00	0,25	-5,3	-8,0	-13,5	-19,0	-24,5	-35,5	-46,5	-57,5
	0,50	-1,5	-4,0	-9,0	-14,0	-19,0	-29,0	-39,0	-49,0
	1,00	6,0	4,0	0,0	-4,0	-8,0	-16,0	-24,0	-32,0
	1,50	13,5	12,0	9,0	6,0	3,0	-3,0	-9,0	-15,0
	2,00	21,0	20,0	18,0	16,0	14,0	10,0	6,0	2,0
	3,00	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0
	4,00	51,0	52,0	54,0	56,0	58,0	62,0	66,0	70,0
	5,00	66,0	68,0	72,0	76,0	80,0	88,0	96,0	104,0
1,25	0,25	-4,3	-7,0	-12,4	-17,8	-23,1	-33,9	-44,6	-55,4
	0,50	0,4	-2,0	-6,8	-11,5	-16,3	-25,8	-35,3	-44,8
	1,00	9,8	8,0	4,5	1,0	-2,5	-9,5	-16,5	-23,5
	1,50	14,4	18,0	15,8	13,5	11,3	6,8	2,3	-2,3
	2,00	28,5	28,0	27,0	26,0	25,0	23,0	21,0	19,0
	2,50	37,9	38,0	38,3	38,5	38,8	39,3	39,8	40,3
	3,00	47,3	48,0	49,5	51,0	52,5	55,5	58,5	61,5
	4,00	66,0	68,0	72,0	76,0	80,0	88,0	96,0	104,0
	5,00	84,8	88,0	94,5	101,0	107,5	120,5	133,5	146,5

33. TÁBLÁZAT FOLYTATÁS

Z_i	Y_{iv}	X_{it}							
		0,25	0,50	1,00	1,50	2,00	3,00	4,00	5,00
1,50	0,25	-3,4	-6,0	-11,3	-16,5	-21,8	-32,3	-42,8	-53,3
	0,50	2,3	0,0	-4,5	-9,0	-13,5	-22,5	-31,5	-40,5
	1,00	13,5	12,0	9,0	6,0	3,0	-3,0	-9,0	-15,0
	1,50	24,8	24,0	22,5	21,0	19,5	16,5	13,5	10,5
	2,00	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0
	3,00	58,5	60,0	63,0	66,0	69,0	75,0	81,0	87,0
	4,00	81,0	84,0	90,0	96,0	102,0	114,0	126,0	138,0
	5,00	103,5	108,0	117,0	126,0	135,0	153,0	171,0	189,0
2,0	0,25	-1,5	-4,0	-9,0	-14,0	-19,0	-29,0	-39,0	-49,0
	0,50	6,0	4,0	0,0	-4,0	-8,0	-16,0	-24,0	-32,0
	1,00	21,0	20,0	18,0	16,0	14,0	10,0	6,0	2,0
	1,50	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0
	2,00	51,0	52,0	54,0	56,0	58,0	62,0	66,0	70,0
	3,00	81,0	84,0	90,0	96,0	102,0	114,0	126,0	138,0
	4,00	111,0	116,0	126,0	136,0	146,0	166,0	186,0	206,0
	5,00	141,0	148,0	162,0	176,0	190,0	218,0	246,0	274,0
3,0	0,25	2,3	0,0	-4,5	-9,0	-13,5	-22,5	-31,5	-40,5
	0,50	13,5	12,0	9,0	6,0	3,0	-3,0	-9,0	-15,0
	1,00	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0	36,0
	1,50	58,5	60,0	63,0	66,0	69,0	75,0	81,0	87,0
	2,00	81,0	84,0	90,0	96,0	102,0	114,0	126,0	138,0
	3,00	126,0	132,0	144,0	156,0	168,0	192,0	216,0	240,0
	4,00	171,0	180,0	198,0	216,0	234,0	270,0	306,0	342,0
	5,00	216,0	228,0	252,0	276,0	300,0	348,0	396,0	444,0

Végül érdemes megemlíteni, hogy ugyanolyan közelítésben (azaz a SZ—SZ kötési energia elhanyagolható és a frekvencia hányadosok értéke egy), ahogy (59) adódott (58)-ból, (62)-ből kapjuk

$$b_i^t = -18 + 18 \exp \left(\frac{B_{vi}}{kT} \right).$$

Ebből a

$$b_i^t/18 + 1 = \exp \left(\frac{B_{vi}}{kT} \right)$$

összefüggésre jutunk, amelynek a bal oldalát logaritmizálva és az $1/T$ függvényében ábrázolva és kikötve, hogy az így kapott egyenesnek át kell mennie az $1/T=0$, $b_i^t/18 + 1=0$ ponton, egy — a 19. ábrán mutatottal analóg és itt is tájékoztató jellegűnek tekinthető — becslést kapunk a SZ—V kötési energiákra: $B_{MgV}=0,02 \pm 0,02$ eV, $B_{CuV}=0,03 \pm 0,02$ eV, $B_{SiV}=0,04 \pm 0,02$ eV.

6. BECSLÉSEK MAKROSZKOPIKUS PARAMÉTEREK ALAPJÁN

A következőkben röviden ismertetjük a ΔQ és az ön- és szennyeződiffúziós gyorsítási faktorok becslésére szolgáló eljárást [124].

Egy AB ötvözetben a Z tracer ($Z=A, B$) diffúziós együtthatójára általában teljesül a (27) Arrhenius-törvény, úgy hogy a D_0 és a Q diffúziós paraméterek függnek a koncentrációtól. A (28) formulában szereplő tagok közül a vakancia képződési és mozgási entalpiák koncentrációfüggését határoztuk meg [124]-ben. A becslést egy — először Manning [18] által ajánlotthoz hasonló — hipotetikus kristályelképzelés alapján végeztük. Feltételeztük, hogy a fenti kristály egy atomjának a tulajdonságai az A és B atomok tulajdonságainak megfelelő átlagolásával nyerhető (lásd [125] d. függelékét is) és hogy a diffundáló A vagy B tracer úgy lehet tekinteni, mint egy „szennyezőt” az „átlagos” atomok kristályában. A vakancia képződési és mozgási entalpiák ($H_v^Z(c)$ és $H_m^Z(c)$, ahol c a B atomok koncentrációja) levezetésekor hasonló megfontolásokat lehet használni mint amilyeneket *Le Claire* tett [16] tiszta fémekben történő szennyező-diffúzióra. Minthogy azonban a korrelációs faktor hőmérsékletfüggését kifejező $C^Z(c)$ mennyiség kiszámolása még tiszta fémekben szennyező-diffúzióra is bonyolult és csak félempirikusan hajtható végre (lásd a 2.3.2. fejezet), ennek a tagnak a becslését nem végeztük el. A tárgyalásban továbbá nem tételeztük fel — ellentétben Manninggel [18] és a [125] közlemény szerzőivel —, hogy a V — SZ kölcsönhatás ebben a hipotetikus mátrixban zérus. Az ötvözetet azonban teljesen rendezetlennak tekintettük, míg [125]-ben az alkotók statisztikus elosztástól való eltérését (rendeződés, kiválás) is figyelembe vették. Ennek a feltételezésnek megfelelően az általunk kapott eredmények kevésbé reálisak kis koncentrációkra, ha a részecskék (A, B atomok és vakanciák) közötti kölcsönhatási energiák nagyok.

A diffúziós paramétereket megadó összefüggések levezetéséhez az alapvető hipotézis az atomközi potenciálok hasonlóságára vonatkozó feltételezés volt. Ilyen értelemben a kapott eredmények a tiszta fémekre érvényes (35) és (36) összefüggések ötvözetekre való általánosításainak tekinthetők. A (37) általánosításaként feltételeztük, hogy az ötvözet potenciális energiáját hasonló,

$$\varphi_{ij}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij} \varphi^*(\vec{r}/a) \quad (66)$$

alakú párpotenciálok összegeként lehet megadni, ahol $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_A$, illetve $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_B$, ha i és j egyidejűleg A , illetve B atomokra utal és $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{AB}$, ha az egyik atom A , a másik pedig B . (66) alapján az ötvözet potenciális energiáját az

$$U(c) = \frac{1}{2} \bar{\varepsilon}(c) \sum_{i,j} \varphi_{ij}^* = \frac{1}{2} \bar{\varepsilon}(c) N \sum_j \varphi_{ij}^* = \frac{1}{2} \bar{\varepsilon}(c) N U^* \quad (67)$$

alakba írhatjuk, ahol U , illetve U^* ugyanolyan helytől való függést mutat, mint (37)-ben, de az egyszerűség miatt ezt (67)-ben nem jelöltük. N az atomok száma és U^* — mint ahogy azt (37)-nél már említettük — univerzális függvénye a redukált helykoordinátáknak az azonos szerkezetű ötvözetekben, és

$$\bar{\varepsilon}(c) = \varepsilon_A + (\varepsilon_B - \varepsilon_A)c + 2c(1-c)\Delta\varepsilon$$

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{AB} - \frac{\varepsilon_A + \varepsilon_B}{2}.$$

Az aktivációs entalpiák becsléséhez (67)-hez hasonlóan felírtuk a kristály potenciális energiáját, amikor a Z tracer mellett vakancia van, illetve amikor a tracer atom nyeregponti helyzetben van, és a megfelelő különbségekből adódtak a $H_m^Z(c)$, illetve $H_v^Z(c)$ koncentrációfüggését jellemző formulák. Figyelembe véve, hogy a tiszta fémek olvadáspontjai (T_A , illetve T_B) jól skálázzák az ε_A , illetve ε_B paramétereket [24] és feltételezve, hogy hasonló skálaszabály érvényes ε_{AB} -re is, felhasználtuk a

$$-\frac{1}{2}\varepsilon_A U^* = \Omega T_A, \quad -\frac{1}{2}\varepsilon_B U^* = \Omega T_B, \quad -\frac{1}{2}\Delta\varepsilon U^* = \Omega\Delta T \quad (68)$$

összefüggéseket (ahol Ω pozitív állandó) és a következő eredményeket kaptuk:

$$H_v^A(c) = \alpha[T_c(c) + \theta c(2\Delta T c - \tilde{T})], \quad (69)$$

$$H_v^B(c) = \alpha\{T_c(c) + \theta\tilde{T} - \theta c[2\Delta T(1-c) + \tilde{T}]\}, \quad (70)$$

$$H_m^A(c) = \gamma(T_A + c\tilde{T}), \quad (71)$$

$$H_m^B(c) = \gamma[T_A + \tilde{T} + c(\tilde{T} - 2\Delta T)]. \quad (72)$$

Itt α , γ és θ univerzális állandók, amelyek nyilvánvalóan függetlenek a koncentrációtól és csak a rácsszerkezetre jellemzőek. α és γ értékeit a $H_v^A(0) = \alpha T_A$ [25] és a $Q^A(0) = H_v^A(0) + H_m^A(0) = (\alpha + \gamma)T_A$ [25, 126] összefüggések alapján kísérleti adatokból lehet meghatározni, és [124]-ben megmutattuk, hogy csak legközelebbi szomszédos kölcsönhatásokat figyelembe véve $\theta = 0,17$. A (69), ..., (72) képletekben szereplő $T_c(c)$ és \tilde{T} paramétereket pedig a

$$T_c(c) = T_A + (T_B - T_A)c + 2\Delta T c(1-c), \quad (73)$$

valamint a

$$\tilde{T} = \frac{T_B - T_A}{2} + \Delta T \quad (74)$$

adja meg. Elemi számolásokból könnyen belátható [124], hogy ΔT arányos az ötvözet egy atomra eső többlet keverési entalpiájával:

$$H(c) = H_{OAB}c(1-c) = -2\Delta T\Omega c(1-c), \quad (75)$$

ahol Ω ugyanaz a konstans, mint a (68) összefüggésekben és értéke lkk ötvözetekben $2,52 \cdot 10^{-3}$ eV/K. [124]-ben azt is megmutattuk, hogy a (73) karakterisztikus hőmérséklet, ha a mérhető társzámzó deformációs járulékok elhanyagolhatóak, akkor megegyezik a Pinesz [127] által definiált szolidusz-likvidusz középvonal ($T_{\text{ál}}(c)$) egyenletével, amelyet az állapotábrából határozhatunk meg úgy, hogy az egyes $T_{\text{ál}}(c)$ hőmérsékleteket a szolidusz és likvidusz koncentrációk számtani közepéhez $\left(c = \frac{c_s + c_l}{2}\right)$ rajzoljuk fel. (73) és (74) alapján az is nyilvánvaló, hogy

$$\tilde{T} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial T_c(c)}{\partial c} \right)_{c=0}. \quad (76)$$

A konkrét becslésekhez tehát vagy a $T_c(c)$ -ben szereplő T_A , T_B és ΔT értékek, vagy a $T_{\text{ál}}(c)$ függvény ismeretére van szükség. Ha a két fém azonos szerkezetű és

a többlet keverési entalpia kísérleti értéke is kellő pontossággal ismert, akkor a $T_{\text{át}}(c)$ felhasználására nincs szükség. Azonban az azonos kristályszerkezet erős megszorítás, és a többlet keverési entalpia is általában elég pontatlanul ismert jelenség. Így a $T_{\text{át}}(c)$ görbe alapján történő számolás — még akkor is, ha a deformációs járulékok elhanyagolása miatt csak igazán ideális rendszerekre ad az előzővel azonos eredményt [124] — jelenleg általánosabban használható. (Ha a kristályszerkezet eltérő (73)-ban T_B helyett egy T'_B értéket kell használni, amely a B anyag A -val azonos szerkezetű hipotetikus allotrop módosulatának olvadáspontját jelenti.)

Az aktivációs entalpiák becslésén kívül azt is megmutattuk [124], hogy a tiszta fémekben szennyező-diffúzióra korábban általunk levezetett összefüggés [128, 129] általánosítása is érvényes koncentrált ötvözetekben:

$$\ln D_0^Z(c) = p \frac{Q^Z(c)}{T_c} + F(c), \quad (77)$$

ahol $D_0^Z(c)$ a preexponenciális faktor és p univerzális konstans az azonos szerkezetű fémekben: $p = 9,0 \cdot 10^3 \text{ K/eV}$ [124]. $F(c)$ elvileg a koncentrációtól gyengén függő, a rácsszerkezetre jellemző tag [124]; a következőkben ennek a koncentrációfüggését elhanyagoljuk.

A fenti eredményeknek a kísérlettel való összevetése céljából [124]-ben kiszámoltuk az aktivációs entalpiák koncentrációfüggését koncentrált Ag-Au, Pb-Tl, Cu-Ni, valamint Al-Zn ötvözetekben és jó egyezést tapasztaltunk a kísérlettel. A következő fejezetekben megvizsgáljuk, hogy a kapott eredményeket hogyan lehet használni alumíniumban, illetve alumínium ötvözetekben a szennyező-diffúzió, illetve az ön- és szennyező-diffúziós együttható koncentrációfüggésének értelmezésére.

6.1. Szennyező-diffúzió tiszta alumíniumban

Szennyező-diffúzióra az első olyan közlemény, amely kvantitatív kapcsolatot állapít meg a ΔQ valamint a tiszta fémek kötési energiája között, 1959-ben jelent meg [43]. Legközelebbi szomszédos (kvázikémiai) kölcsönhatásokat figyelembe véve, a korrelációs effektusokból származó C tagot elhanyagolva számoltak és megfelelő egyezést kaptak a kísérletekkel. A [25]-ben kapott eredmények annyiban különböznek az előzőektől, hogy a levezetésekben nem csak legközelebbi szomszédos kölcsönhatásokat vettek figyelembe, hanem Morse-potenciálokat használtak és a (66), illetve (67)-hez hasonló alakú formulákban az univerzális faktorokat nyolc koordinációs héjra összegezve — a relaxációkat is figyelembe véve — számolták ki. Ezen kívül itt következetesen kihasználták a $Q^A(0)/T_A = \text{konst.}$, valamint a $H_v^A(0)/T_A = \text{konst.}$ összefüggéseket és a C értékét is becsülték. Azonban az általunk kapott eredményekkel szemben a $\Delta T = 0$ közelítést használták és T_B -nek mindig az adott fém olvadáspontját vették. (Ezt az esetet ezentúl mindig Neumann—Hirschwald-közelítésnek fogjuk nevezni és NHK-val jelöljük.)

A (69) és (70) egyenletekből a szennyező—vakancia-kötési energiára $c=0$ -nál a

$$B_{vi} = -[H_v^B(0) - H_v^A(0)] = -\alpha \theta \tilde{T} \quad (78)$$

adódik. Ezt az eredményt összehasonlíthatjuk a [25] (11) és (29) összefüggéséből nyerhető

$$B_{vi} = -0,17 \cdot 0,47 \cdot \frac{Q^A(0)}{T_A} \cdot \frac{1}{2} (T_B - T_A)$$

kifejezéssel, ha ezt a $H_v^A(0) = 0,53 Q^A(0)$ relációt és a $H_v^A(0) = \alpha T_A$ összefüggést felhasználva a

$$B_{vi} = -0,15\alpha \cdot \left(\frac{T_B - T_A}{2} \right) \quad (79)$$

alakba írjuk. Figyelembe véve, hogy legközelebbi szomszédos közelítésben $\theta = 0,17$ [124], és hogy [25]-ben $\Delta T = 0$, a (78) és (79) egyezése kiváló. Minthogy a θ értékét nyolc koordinációs héjra összegezve határozták meg [25]-ben, a konkrét számolásokban a $\theta = 0,15$ értéket fogjuk használni. Hasonló (a potenciál univerzális részének meghatározására vonatkozó) számolásokból a Le Claire-modellben (lásd 3.3.2. fejezet) szereplő aktivációs entalpia különbségekre a

$$\begin{aligned} \Delta H_{m1} &= 0,19 \Delta H_{mi}, \\ \Delta H_{vi} &= 0,17 \Delta H_{mi}, \\ \Delta H_{m3} &= -0,16 \Delta H_{mi} \end{aligned} \quad (80)$$

eredményeket kapták, amelyekben szereplő arányossági faktorokat szintén fel fogjuk használni C becsléséhez.

Mielőtt az alumíniumra vonatkozó számolások ismertetésére rátérnénk, érdemes megemlíteni, hogy [104]-ben ezüstben és rézben szennyező-diffúzióra végzett becslésekből azt a következtetést vontuk le, hogy \tilde{T} pontosabb értékének figyelembevétele csak néhány nagyobb vegyértékű szennyező (Pb, Sb, Tl) esetén adott jobb egyezést a kísérlettel mint a NHK [25].

Alumíniumban először a (78) formula szerint a SZ—V kötési energiákat számoltuk ki ($\alpha = 0,70 \cdot 10^{-3}$ eV/K, $\gamma = 0,62 \cdot 10^{-3}$ eV/K, $\theta = 0,15$) [130]. A 34. táblázatban láthatók a NHK-ben $\left(\tilde{T}_1 = \frac{1}{2} (T_B - T_A) \right)$, az állapotábrák alapján [131, 132]

$\left(\tilde{T}_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial T_c(c)}{\partial c} \right)_{c=0} \right)$, valamint a (75) formula felhasználásával ($\tilde{T}_3 = 1/2 (T'_B - T_A) + \Delta T$) számolt \tilde{T} értékek és B_{vi} energiák. A \tilde{T}_2 mennyiségek meghatározásakor a [131]-ben szereplő állapotábrákat használtuk, kivételt csak a Si esetén tettünk, az első adatot [132]-ből vettük. (A többi elemre a [131] és [132]-ből származó értékek eltérése általában kisebb mint 15%.)

A \tilde{T}_3 mennyiségeket Cu és Ag ötvözőkre az olvadáspont és a (75) formula, míg cinkre a (75) összefüggésből kapott ΔT és T_{Al} felhasználásával a $T_{Al}(c)$ görbéhez a (73) illesztésével kapott T'_B segítségével határoztuk meg. A cinkre kapott két érték arra utal, hogy [132]-ben és [2]-ben két különböző keverési entalpiát adnak meg, és mi mindkettővel számoltunk.

A B_{vi} értékeket a 3. táblázat kísérleti adataival összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy a NHK-ből és \tilde{T}_3 -ból kapott energiák néhány esetben (pl. Cu) valószínűleg előjelben is rosszak, míg a \tilde{T}_2 -ből számolt értékek jó egyezést adnak.

34. TÁBLÁZAT

A különböző közelítésekben számolt \tilde{T}_1 , \tilde{T}_2 és \tilde{T}_3 értékek és a megfelelő szennyező—vakancia kötési energiák

Szennyező	\tilde{T}_1 (K)	B_{vi} (eV)	\tilde{T}_2 (K)	B_{vi} (eV)	\tilde{T}_3 (K)	B_{vi} (eV)
Cu	212	-0,022	-563	0,059	111	-0,012
Si	375	-0,039	-465	0,049		
			-648	0,069		
Mg	-5	0,001	-373	0,039		
Ag	151	-0,016	-398	0,042	84	-0,009
Zn	-120	0,013	-260	0,027	-131	0,014
					-159	0,017
Li	-240	0,025	-60	0,007		
Ge	139	-0,015	-610	0,064		
Ga	-315	0,033				
Cd	-170	0,018				
In	-252	0,026				
Sn	-214	0,022				
Sb	-29	0,003				
Au	202	-0,021				

Meg kell jegyezni, hogy az irodalomban vannak olyan próbálkozások, amelyekben B_{vi} értékeit a szolidusz vonal kezdeti meredekségéből számolják [68, 133]. Az általunk kapott eredmények szerint ezek az eljárások csak akkor adnak reális adatokat, ha a $T_c(c)$ és a szolidusz kezdeti meredeksége közel azonos.

Míthogy a NHK és a \tilde{T}_3 értékek már a SZ—V kötési energiákra sem minden esetben adtak helyes eredményeket, a továbbiakban csak a \tilde{T}_2 -ből kapott energiákat használjuk és a ΔQ értékeket is csak ezek alapján számoltuk ki. Az eredményeket a 35. táblázat tartalmazza ($T=0,85 T_{A1}$ hőmérsékleten végeztük a C becslését). A kísérleti és a C számolásához felhasznált adatokra vonatkozóan ugyanazok a megjegyzések tehetők, mint a 26. táblázatnál. Látható, hogy míg az elektrosztatikus árnyékolásból számolt értékek (26. és 27. táblázatok) a becslésben használt fázistolás-rendszerrel függően előjelben is bizonytalanok voltak, addig az itt kapott adatok abszolút értéke tűnik a kísérleti értékeknél nagyobbak. Ez utóbbi tény esetleg azzal is összefüggésben lehet, hogy az entalpiakülönbségek becsléséhez használt (80) relációkban szereplő, a [25]-ben meghatározott arányossági faktorok értékei nem pontosak.

35. TÁBLÁZAT

A 34. táblázatban szereplő \tilde{T}_2 értékek segítségével számolt ΔH_{mi} , C és ΔQ energiák

Szennyező	ΔH_{mi} (eV)	C (eV)	ΔQ (eV)
Cu	-0,347	-0,121	-0,285
Si	-0,288	-0,161	-0,176
Si	-0,406	-0,322	-0,155
Mg	-0,229	-0,048	-0,220
Zn	-0,159	-0,043	-0,143
Ag	-0,247	-0,058	-0,231
Ge	-0,376	-0,201	-0,238

6.2. Öndiffúzió híg alumínium ötvözetekben

Az öndiffúziós együttható koncentrációfüggését jellemző, a (30) kifejezésben szereplő β faktorok meghatározása céljából — a diffúziós együtthatókra a (27) Arrhenius-törvény érvényességét feltételezve és (77)-ben az $F(c)$ mennyiség koncentrációfüggését elhanyagolva — egyszerű átalakítás után nyerjük:

$$\ln \frac{D_0^Z(c)}{D_0^Z(0)} = p \left(\frac{Q^Z(c)}{T_c(c)} - \frac{Q^Z(0)}{T_A} \right) - \frac{Q^Z(c) - Q^Z(0)}{kT}. \quad (81)$$

Megmutattuk [124], hogy ha $\left| \frac{2c}{T_A} (c\Delta T - \tilde{T}) \right| \ll 1$, akkor az $1/T_c(c)$ mennyiség sorbafejthető és a lineáris tagoknál megállva:

$$\frac{1}{T_c(c)} = \frac{1}{T_A} \left[1 + \frac{2c}{T_A} (c\Delta T - \tilde{T}) \right] \quad (82)$$

(A fenti feltétel híg ötvözetekre csaknem automatikusan teljesül.) (81)-ből (69), (71), valamint (82) segítségével a (30) szerinti öndiffúziós gyorsítási faktorra kapjuk:

$$\beta(T) = - \left\{ p \frac{\tilde{T}}{T_A} (\gamma + \alpha\theta) + \frac{1}{kT} \tilde{T} [\gamma + \alpha(2 - \theta)] \right\}. \quad (83)$$

A (83) formula alapján α , γ és θ értékeire a 6.1. fejezetben megadott értékeket véve és a $p = 9,0 \cdot 10^3$ eV/K [124], valamint a $kT = 0,067$ eV értékeket használva, kiszámoltuk az öndiffúziós gyorsítási faktor értékeit a 34. táblázatban megadott \tilde{T}_2 mennyiségek alapján (36. táblázat). Az öndiffúziós gyorsítási faktorok meghatáro-

36. TÁBLÁZAT

A 34. táblázatban szereplő \tilde{T}_2 értékek segítségével a (83), illetve a (84) kifejezések alapján számolt öndiffúziós gyorsítási együtthatók

Ötvöző	β	b
Cu	20,0	22,5
Si	23,0	32,2
	16,6	17,3
Mg	13,3	10,2
Ag	14,2	11,5
Zn	9,3	5,8
Li	2,1	1,0
Ge	21,7	27,3

zására ugyanakkor az (51)-ből az $f_0 = f_1 = f_2$ feltételezéssel és az ω_1/ω_0 , ω_2/ω_0 hányadosokra a Le Claire-modellben használt becsléseket figyelembe véve adódó

$$b = -18 + \left[4 \exp \left(- \frac{\Delta H_{m1}}{kT} \right) + 14 \exp \left(- \frac{\overline{\Delta H_{m3}}}{kT} \right) \right] \exp \left(\frac{B_{vi}}{kT} \right) \quad (84)$$

alapján is van lehetőség, úgy hogy most az energiákat nem az elektrosztatikus elméletből vesszük, hanem (78) (vagy (79)) és (80) alapján számoljuk. [124]-ben ezüst ötvözetekre elvégeztük (83) és (84) alapján is a számolásokat (mindkét esetben úgy, hogy \tilde{T} értékét NHK-ban is kiszámoltuk) és a kísérlettel akkor kaptuk a legjobb egyezést, amikor (83)-at használtuk és nem NHK-t vettük.

Híg alumínium ötvözetekre teljesen hasonlóan számolt öndiffúziós gyorsítási faktorokat szintén tartalmazza a 36. táblázat. Látható, hogy a (83) és (84) formulából a \tilde{T}_2 értékek alapján kapott öndiffúziós gyorsítási faktorok jól egyeznek egymással és a 28. táblázat utolsó sorában feltüntetett azon kísérleti tapasztalattal, amely szerint b értéke 0 és 10 közé esik a vizsgált hőmérsékleten.

6.3. Szennyező-diffúzió híg alumínium ötvözetekben

6.3.1. Szennyező-diffúzió kétalkotós alumínium ötvözetekben

A 6.2. fejezetben az öndiffúziós gyorsítási faktor meghatározásához teljesen hasonlóan (81)-ből (70) és (72), valamint (82) segítségével a szennyező-diffúziós együtthatónak a tracerrel azonos szennyező általi gyorsítási faktorára a

$$\beta_i(T) = \beta(T) - 2(\gamma + \alpha\theta) \left[p \left(\frac{T}{T_A} \right)^2 + \Delta T \left(\frac{p}{T_A} - \frac{1}{kT} \right) \right] \quad (85)$$

adódik. Minthogy a (85) alapján történő számoláshoz a ΔT értékek ismeretére is szükség van, először ezeket a mennyiségeket határoztuk meg a (75) formula alapján [134], úgy, hogy az oldékonysági határok hőmérsékletfüggéséből számoltuk ki H_{0AB} értékét [135]. A 37. táblázat tartalmazza a számolt ΔT és β_i mennyiségeket,

37. TÁBLÁZAT

A (75) kifejezés alapján kapott értékek,
valamint a (85) alapján számolt ötvöző gyorsítási
együtthatók és a kísérleti értékek

Ötvöző	ΔT (K)	β_i	$\beta_{i, \text{exp}}$
Cu	-95	15,2	~ 17 [55] ~ 0 [55], [99] $10,6 \pm 0,5$
Si	-104	16,7	
Mg	-56	11,2	
Ag	-63	11,8	
Zn	-54	8,3	
Li	-25	2,0	
Ge	-58	16,1	

valamint a kísérleti eredményeket. Látható, hogy a kísérleti és elméleti értékek egyezése itt is jó, és hogy valamennyi esetben a szennyező-diffúziós gyorsítási faktor kisebb mint a megfelelő öndiffúziós gyorsítási faktor (lásd a 36. táblázatot is).

A SZ—V és a V—V kötési energiák [124]-ben használt meghatározásához hasonlóan a SZ—SZ kötési energiára is megadhatunk egy képletet:

$$B_{ii} = -\theta\Omega(\tilde{T} - 2\Delta T). \quad (86)$$

38. TÁBLÁZAT

A (86) alapján számolt szennyező-szennyező
kötési energiák értékei

Szennyező	B_{ii} (eV)
Cu	0,141
Si	0,097
	0,166
Mg	0,099
Ag	0,103
Zn	0,057
Li	0,004
Ge	0,187

A (86) alapján számolt B_{ii} energiákat tartalmazza a 38. táblázat és látható, hogy a kapott B_{ii} mennyiségek nagyobbak, mint B_{vi} , míg pszeudopotenciál módszerrel az adódott, hogy B_{ii} mintegy harmad része a SZ—V kötési energiának [40]. Kritikai megjegyzésként — amely egyben a fenti eltéréseket is magyarázhatja — megjegyezzük, hogy sem a pszeudopotenciál módszerekben, sem az általunk kidolgozott fenomenologikus modellben a szennyező körüli relaxációkat nem vették illetve nem vettük figyelembe.

A 34., illetve a 38. táblázatokban adott B_{vi} , illetve B_{ii} energiákat felhasználva a 33. táblázatban szereplő b_i^i értékeket figyelembe véve megbecsülhetjük Z értékeit (lásd (58)-at a $Z = \omega_{ii}/\omega_2 = \omega_{i3}/\omega_2$ feltételezéssel) a kísérleti β_{Zn}^Z , b_{Ag}^A [99] és a b_{Cu}^{Cu} [55] eredmények alapján és a következő értékeket kapjuk: $Z \approx 1,25$ AlZn, $Z \approx 1$ AlAg és $Z \approx 1,25$ AlCu ötvözetekben. (Azt a tényt, hogy a 33. táblázatot az $Y_{ZnV} = 1,60$ értékkel számoltuk ki, a (64) zárójelében levő utolsó tagban az $Y_{ZnV} = 1,50$, $Y_{AgV} = 1,88$ és az $Y_{CuV} = 2,42$ helyettesítéseknek megfelelő kis korrekciókkal vettük figyelembe.) A kapott eredmények is megerősítik az 5.3.1. fejezetben levont következtetéseket: a fenti szennyezők alumíniumban kis perturbációkat jelentenek és környezetükben a velük kémiailag azonos tracer ugrási frekvenciáit gyengén módosítják.

6.3.2. Szennyező-diffúzió háromalkotós alumínium ötvözetekben

A [124]-ben adott modell alapján formálisan arra is lehetőség van, hogy formulát adjunk meg egy másfajta ötvözőnek adott szennyező-tracer diffúzióját gyorsító hatásra [134]:

$$\beta_i^i = \beta_i - 2(\gamma + \alpha\theta) \left[\frac{p}{T_A} - \frac{1}{kT} \right] [\Delta T_{ii} - \Delta T_i], \quad (87)$$

ahol ΔT_{ii} jelenti a (74), illetve (75) szerinti hőmérsékletet az Al-t rendszerre vonatkozóan. A ΔT_{ii} ugyanakkor a t és i ötvözők alumíniumban vett keverési entalpiájával arányos mennyiséget jelenti. Ez utóbbi mennyiséget termodinamikai adatokból jelenleg nem tudjuk becsülni, így (87) felírása elég formálisnak tűnik. Azonban, ha ΔT_{ii} és ΔT_i nem nagyon különböznek (minthogy $2(\gamma + \alpha\theta) [p/T_A - 1/kT] = 0,765 \cdot 10^{-3} \text{ 1/K}$, ha $|\Delta T_{ii} - \Delta T_i| < 1000$, amely feltétel a 38. táblázat adatait

figyelembe véve nem tűnik túl erősnek), akkor azt kapjuk, hogy $\beta_i^t \approx \beta_i$, azaz az i szennyező hasonlóan gyorsítja a t -nek és az i -nek is a diffúzióját. Bár a fentiek szerint a 39. táblázatban mutatott értékek már nem új információk (lásd a 37. táblázatot), a jobb áttekinthetőség és a kísérlettel való jobb összehasonlíthatóság miatt mégis közöljük ezeket. Látható, hogy az egyezés a kísérleti adatokkal jó.

39. TÁBLÁZAT

A (87) összefüggés segítségével becsült
 β_i^t gyorsítási együtthatók értékei

$i, \quad t$	β_i^t	
	számolt	kísérleti
Si, Zn	16,7	19 ± 4
Cu, Zn	15,2	$12,2 \pm 0,9$
Mg, Zn	11,0	$4,8 \pm 0,1$
Mn, Zn	3,5	
Li, Zn	2,5	
Ag, Zn	11,8	
Cu, Ag	15,2	10 [55]
Zn, Mg	8,3	7 [55]
Ag, Cu	11,8	13 [55]

7. ÖSSZEFOGLALÁS

Megállapítottam, hogy a Mg, Zn, Cu és Si ötvöző atomok a felírt sorrendben, a (30) összefüggés szerint gyorsítják a ^{65}Zn diffúziós együtthatóját. A vizsgált ötvözetek diffúziós szempontból jó közelítéssel hígnak tekinthetők, minthogy három esetet (AlZn ötvözetekben a három legalacsonyabb hőmérsékleten kapott értéket) leszámítva a (30) exponenciális és a (29) lineáris illesztésből kapott együtthatók hibahatáron belül megegyeznek és a különféle ötvözőknek a gyorsító hatása a vizsgált hőmérséklet és koncentráció tartományban additív. A vas és az ittrium hatását — első sorban a szilárdoldatba vihető kis koncentrációk miatt — nem tudtam kimutatni. Megállapítottam, hogy valamennyi összetételnél a diffúziós együtthatók követik a (27) Arrhenius-törvényt és az aktivációs entalpiák és preexponenciális faktorok gyakorlatilag nem függenek a koncentrációtól. A β_i^{Zn} együtthatók AlZn ötvözetekben gyenge hőmérsékletfüggést mutatnak, értékük csökkenő hőmérséklettel növekszik. A többi ötvözetben a vizsgált hőmérséklettartományban az általunk elért mérési pontosság mellett ezek az együtthatók gyakorlatilag a hőmérséklettől függetlennek tekinthetők.

A kísérleti eredményeket *mikroszkopikus modellek* alapján értelmezve a következő eredményeket kaptam. Szennyező-diffúzióra (Le Claire-modell) és az öndiffúziós együtthatók koncentrációfüggésére (Lidiard- és Santoro-modellek) — az ötvöző körüli elektrosztatikus árnyékolást leíró oszcilláló aszimptotikus és preaszimptotikus potenciál alakok felhasználásával — végzett becslések csak nagyságrendileg adják vissza az eredményeket, sőt néha még előjelben is rosszak. Ez arra utal, hogy a szennyező körüli árnyékolást jellemző potenciál pontos menetét a legközelebbi szomszédos távolság környezetében jelenleg nem tudjuk egyértelműen megadni és a becslés-

hez használt modellek érvényességéről sem lehet dönteni. A $\beta_{\text{Zn}}^{\text{Zn}}$ kísérleti gyorsítási faktorok értelmezéséhez az (58) Le Claire-féle összefüggést használtam. Az $\omega_{\text{Zn1}} = \omega_{\text{Zn3}} = \omega_2$ és $B_{\text{ZnZn}} = 0$ feltételezésnél a cink-vakancia kötési energia közelítő értéke $(0,03 \pm 0,01)$ eV adódott. Ha csak azt tételezzük fel, hogy $\omega_{\text{Zn1}}/\omega_2 = \omega_{\text{Zn3}}/\omega_2 = Z_{\text{Zn}}$, akkor a kötési energiákra pszeudopotenciál módszerrel számolt $B_{\text{ZnV}} = 0,031$ eV és $B_{\text{ZnZn}} = 0,011$ eV értékeket használva $Z_{\text{Zn}} = 1,04$, azaz a diffundáló tracer frekvenciái az ötvöző atom környezetében alig változnak. A Mg, Cu és Si ötvözők hatásának értelmezéséhez az (58) általánosítását (lásd a (63) képletet) használtam és feltételeztem, hogy $\omega_{\text{I1}}/\omega_2 = \omega_{\text{I3}}/\omega_2 = Z_{\text{I}}$. Figyelembe véve, hogy a B_{iv} és a B_{izn} kötési energiák 10^{-2} eV nagyságrendűek, $0,5 < Z_{\text{I}} < 2,0$ adódott, azaz a vizsgált alumínium ötvözetekben az ötvöző atom környezetében a tracer ugrási frekvenciái kettes faktornál kisebb mértékben változnak. Ha azt is feltételezzük, hogy $Z_{\text{I}} = 1$, akkor az ötvöző—vakancia kötési energiákra a következő, közelítő értékek adódnak: $B_{\text{MgV}} = (0,02 \pm 0,02)$ eV, $B_{\text{CuV}} = (0,03 \pm 0,02)$ eV és $B_{\text{SiV}} = (0,04 \pm 0,02)$ eV.

A kísérleti eredmények *makroszkopikus modellek* alapján történő értelmezéséhez — az atomok közötti potenciálok hasonlóságát felhasználva — a B_{ii} és B_{vi} kötési energiák kiszámolására alkalmas összefüggéseket vezettem le és analitikus kifejezéseket kaptam az ön- és szennyező-diffúziós együtthatók koncentrációfüggését jellemző együtthatókra is. A levezetett kifejezésekben — univerzális állandók mellett, amelyeket tiszta fémekben kapott diffúziós adatokból meg lehet határozni — csak a két tiszta fém olvadáspontja és keverési entalpiája szerepel. Kétalkotós ötvözetekben az ötvözővel kémiai azonos tracer diffúziójára vonatkozó β_{I} együtthatókra számolt értékek jó egyezésben vannak a kísérleti adatokkal és a kapott eredmények megerősítették, hogy nem átmeneti fém szennyezők alumíniumban kis perturbációt okoznak, és környezetükben a diffundáló tracer ugrási frekvenciái gyengén változnak.

A vizsgálatokat az ALUTERV Fémipari Kutató Intézet megbízásából az „Alumíniumipar Fejlesztése” országosan kiemelt célprogram részét képező „Konkrét felhasználási igényeket kielégítő célötvözetek és optimális gyártási technológiájuk kialakítása” című kutatási-fejlesztési téma keretében folytattak. Így eredményei a Magyar Alumíniumipari Tröszt vállalataival közös műszaki fejlesztés keretében kerülnek felhasználásra.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok *dr. Kedves Ferencnek*, tanszékvezetőmnek a téma felvetéséért, segítségéért, munkám során nyújtott sokoldalú támogatásáért, a Tanszéken a kutatásokhoz szükséges optimális feltételek megteremtése érdekében végzett munkájáért. Köszönetemet fejezem ki kollégáimnak, *dr. Gödény Imrénnek* és *dr. Erdélyi Gábornak* közös munkánkban mutatott önzetlen támogatásukért, a technikai részletek megoldásához nyújtott segítségükért, az elméleti problémák megoldásában való közreműködésükért, valamint hasznos kritikai megjegyzéseikért.

Köszönettel emlékezem *dr. Groma Gézára*, aki nagy figyelemmel kísérte munkánkat, a vizsgált ötvözet-típusok kiválasztását javasolta és eredményeink jelentős részének feldolgozásában is részt vett. Ezúton is szeretnék köszönetet mondani az ALUTERV—FKI vezetőinek, munkatársainak és személy szerint *dr. Kovácsné Csetényi Erzsébetnek* a minták elkészítéséért, a téma gyakorlati fontosságát megvilágító hasznos konzultációkért.

Köszönetemet fejezem ki *dr. Geszti Tamásnak* az elméleti problémák megoldásában nyújtott segítségéért.

Megköszönöm *Nagy Máriának* a mérésekben, a mérési adatok feldolgozásában nyújtott pontos, nagy figyelmet igénylő munkáját. Köszönetet mondok a Tanszék minden oktatójának és dolgozójának, akik valamilyen formában vagy módon hozzájárultak az eredmények megszületéséhez. Megköszönöm *Szabados Sándornak* a dolgozat gépelésében, az ábrák elkészítésében nyújtott pontos, lelkiismeretes munkáját.

IRODALOM

1. Fényes Imre, Termosztatika és termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1968.
2. R. A. Swalin, Thermodynamics of Solids, John Wiley Sons, New York, 1963.
3. Kedves F., Beke D. L., Diffúzió szilárdtestekben. Fizika 78, Gondolat, Budapest, 1979. 193 old.
4. P. G. Shewmon, Diffusion in Solids, McGraw-Hill Co, New York, 1963.
5. D. Lazarus, Solid State Physics 10, 71, 1960.
6. Y. Adda, J. Philibert, La Diffusion dans les Solids, Presses Universitaires de France, Paris, 1966.
7. H. Eyring, J. Chem. Phys. 3, 107, 1935.
8. C. A. Wert, C. Zener, Phys. Rev. 76, 1169, 1949.
9. C. A. Wert, Phys. Rev. 79, 601, 1950.
10. G. H. Vineyard, J. Phys. Chem. Solids 3, 121, 1957.
11. A. D. Le Claire, Phil. Mag. 14, 1271, 1966.
12. C. P. Flynn, Point defects and diffusion, Clarendon Press, Oxford, 1972.
13. N. L. Peterson, J. Nuclear Mat. 69—70, 3, 1978.
14. S. A. Rice, Phys. Rev. 112, 804, 1958.
15. T. Geszti, phys. stat. sol. 20, 165, 1967.
16. A. D. Le Claire, Phys. Mag. 7, 141, 1962.
17. Processzi vzaimnoj diffuziji v szplavah. Szerk.: K. P. Gurov, Nauka, Moszkva, 1973.
18. J. R. Manning, Diffusion Kinetics for atoms in crystals, D. Van Nostrand Co., Inc. Princeton, 1968.
19. J. W. Miller, Diffusion Processes I. (Ed. by J. N. Sherwood), Gordon and Breach, London, 1971.
20. W. K. Warburton, J. Phys. Chem. Solids 34, 451, 1973.
21. A. D. Le Claire, J. Nuclear Mat. 69—70, 70, 1978.
22. A. D. Du Charmé, H. T. Weaver, Phys. Rev. B5, 330, 1972.
23. C. Zener, J. Appl. Phys. 22, 372, 1951.
24. T. Geszti, Phys. Letters, 29A, 425, 1969.
25. G. Neumann, W. Hirschwald, phys. stat. sol. b 55, 99, 1973.
26. N. H. March, J. Nuclear Mat. 69—70, 490, 1978.
27. L. C. R. Alfred, N. H. March, Phil. Mag. 2, 985, 1957.
28. A. Seeger, H. Bross, Z. Phys. 145, 161, 1956.
29. D. Lazarus, Phys. Rev. 93, 973, 1974.
30. N. H. March, H. N. Murray, Proc. Roy. Soc. A 261, 119, 1961.
31. J. Friedel, Phil. Mag. 43, 153, 1952.
32. W. Kohn, S. H. Vosko, Phys. Rev. 119, 913, 1960.
33. J. S. Langer, S. H. Vosko, J. Phys. Chem. Solids 12, 196, 1960.
34. F. J. Blatt, Phys. Rev. 108, 285, 1957.
35. A. Meyer, G. M. Stocks, W. H. Young, J. Phys. F. 3, 1381, 1973.
36. E. Mrosan, G. Lehman, H. Woittenek, phys. stat. sol. b 64, 131, 1974.
37. L. C. R. Alfred, D. O. Van Ostenburg, Phys. Rev. 161, 569, 1967.
38. J. M. Brettel, A. J. Heeger, Phys. Rev. 153, 319, 1967.
39. J. A. Gardner, Phys. Rev. B14, 1395, 1976.
40. O. Takai, R. Yamamoto, M. Doyama and Y. Hisamatsu, Phys. Rev. B 10, 3113, 1974.
41. R. Yamamoto, O. Takai and M. Doyama, J. Nucl. Mater. 69—70, 727, 1978.
42. P. S. Ho, R. Benedek, J. Nucl. Mater. 69—70, 730, 1978.
43. D. Turnbull, R. E. Hoffmann, Acta Met. 7, 407, 1959.
44. A. D. Le Claire, A. D. Lidiard, Phil. Mag. 1, 518, 1956.
45. N. L. Peterson, S. J. Rothman, Phys. Rev. B 1, 3264, 1970.
46. M. Beyeler, F. Maurice, R. Seguin, Mem. Scient. Rev. Metallurg. 67, 295, 1970.
47. S. M. Edelglass, M. Ohring, Trans. AIME 245, 1479, 1969.
48. G. M. Hood, R. J. Schultz, Phil. Mag. 23, 297, 1971.
49. M. S. Anand, R. P. Agarwala, Phil. Mag. 26, 297, 1972.
50. M. Minier, Phys. Rev. 182, 437, 1968.
51. A. P. Blandin, J. Friedel, J. Phys. Rad. 21, 689, 1960.
52. A. R. Du Charmé, G. K. Straub, phys. stat. sol. b 69, K23, 1975.
53. O. Takai, R. Yamamoto, M. Doyama, Y. Hisamatsu, J. Phys. F: Metal Phys. 5, L83, 1975.
54. P. S. Ho, R. Benedek, IBM Research Report (b), 69, 1974.
55. W. B. Alexander, L. M. Slifkin, Phys. Rev. B 1, 3274, 1970.
56. R. A. Swalin, Acta Met. 5, 443, 1957.
57. J. S. Koehler, T. Kino, J. Phys. Chem. Solids 29, 237, 1968.

58. R. E. Hoffmann, D. Turnbull, E. Hart, *Acta Met.* 3, 417, 1955.
59. A. B. Lidiard, *Phil. Mag.* 5, 1711, 1960.
60. W. Schapink, *Phil. Mag.* 12, 1055, 1965.
61. R. E. Howard, J. R. Manning, *Phys. Rev.* 154, 561, 1964.
62. J. L. Bocquet, *Saclay Rept. CEA-R-4292*, 1972.
63. C. J. Santoro, *Phys. Rev.* 179, 593, 1969.
64. A. D. Le Claire, magánközlés.
65. J. P. Stark, *J. Appl. Phys.* 11, 4404, 1972.
66. J. P. Stark, *Acta Met.* 22, 1349, 1974.
67. R. L. Rowland, N. H. Nachtrieb, *J. Phys. Chem.* 67, 2817, 1963.
68. A. van den Beukel, *phys. stat. sol.* 23, 165, 1967.
69. A. Beerwald, *Z. Elektrochemie*, 45, 789, 1939.
70. J. E. Hilliard, B. L. Averbach, M. Cohen, *Acta Met.* 7, 86, 1959.
71. S. Ceresara, T. Federighi, F. Pieragostini, *phys. stat. sol.* 16, 439, 1966.
72. A. Chatterjee, D. J. Fabian, *Scripta Met.* 4, 285, 1970.
73. I. Gődény, D. L. Beke, F. J. Kedves, *phys. stat. sol. a* 13, K155, 1972.
74. D. Bergner, E. Cyrener, *Neue Hütte* 18, 9, 1973.
75. S. Fujikawa, K. Hirano, *Trans. of Jap. Inst. of Met.* 17, 809, 1976.
76. D. L. Beke, I. Gődény, F. J. Kedves, G. Groma, *Acta Met.* 25, 539, 1977.
77. D. L. Beke, Diffusion of ⁶⁵Zn in Binary and Ternary Al-alloys with Solutes Zn, Mg, Fe, Si and Cu. *Wissenschaftliche Zeitschrift der Pädagogischen Hochschule „N. K. Krupskaja“ Halle, XV*, 16, 1977.
78. T. R. Anthony, *Phys. Rev.* B2, 264 (1970).
79. T. R. Anthony, *J. Appl. Phys.* 41, 3969, 1970.
80. D. Bartdorf and P. Reimers, *phys. stat. sol. a* 28, 433, 1975.
81. N. L. Peterson, S. J. Rothman, *Phys. Rev.* B17, 4666, 1978.
82. M. Doyama, *J. Nucl. Mater.* 69—70, 350, 1978.
83. J. Takamura, M. Koike, K. Furukawa, *J. Nucl. Mater.* 69—70, 738, 1978.
84. T. Federighi, *Int. Conf. „Lattice Defects in Quenched Metals“*. New York. 1965.
85. A. J. Perry, *Acta Met.* 14, 1143, 1966.
86. M. Murakami, O. Kawano, Y. Murakami, *Acta Met.* 17, 29, 1969.
87. Beke D. L., Diffúzió hig alumíniumalapú ötvözetekben. *ALUTERV—FKI Közlemények*, Budapest 1976.
88. D. R. Beaman, R. W. Balluffi, R. O. Simmons, *Phys. Rev.* A137, 917, 1965.
89. D. R. Beaman, R. W. Balluffi, R. O. Simmons, *Phys. Rev.* A134, 532, 1964.
90. J. Burke, A. D. King, *Phil. Mag.* 21, 7, 1970.
91. A. D. King, J. Burke, *Acta Met.* 18, 205, 1972.
92. C. L. Snead, Jr. Thomas, M. Hall. A. N. Goland, *Phys. Rev. Letters* 29, 62, 1972.
93. S. N. Sing, *Scripta Met.* 4, 147, 1970.
94. G. Böhm, V. Gerold, *Scripta Met.* 4, 269, 1970.
95. P. Doing, J. W. Edington, *Phil. Mag.* 28, 961, 1973.
96. P. Doing, J. W. Edington, *Phil. Mag.* 28, 971, 1973.
97. P. Doing, J. W. Edington, *Phil. Mag.* 29, 217, 1974.
98. D. A. Porter, P. Doing, J. W. Edington, *Phil. Mag.* 29, 437, 1974.
99. T. Heumann, H. Böhmer, *J. Phys. Chem. Solids* 29, 237, 1968.
100. T. G. Stoebe, R. D. Gulliver, T. O. Ogurtani, R. A. Huggins, *Acta Met.* 13, 701, 1965.
101. T. J. Rowland, F. Y. Fradin, *Phys. Rev.* 182, 760, 1969.
102. J. Burke, T. R. Ramachandran, *Phil. Mag.* 24, 629, 1971.
103. I. Gődény, Egyetemi doktori értekezés, Debrecen, 1975.
104. D. L. Beke, Egyetemi doktori értekezés, Debrecen, 1975.
105. I. Gődény, S. Czellár, F. J. Kedves, *Acta Phys. Chim. Debrecina* 18, 83, 1972—73.
106. D. Bergner, Diffusion in Metallischen Werkstoffen VEB, Deutscher Verlag für Grundstoff-industrie, Leipzig, 1970.
107. M. Jurisch, Diffusion in Metallischen Werkstoffen, VEB, Deutscher Verlag für Grundstoff-industrie, Leipzig, 1970.
108. Á. Csanády, V. Stefániai, D. L. Beke, *Mat. Sci. Eng.* 38, 55, 1979.
109. T. S. Lundy, R. A. Padgett, *Trans. AIME* 242, 1897, 1968.
110. D. L. Beke, I. Gődény, F. J. Kedves, *Z. Metallkde* 65, 382, 1974.
111. J. S. Traktenberg, *Fiz. Metall. i Metalloved.*, 37, 348, 1974.
112. A. Hässner, *Isotopenpraxis* 5, 143, 1969.

113. Jánosy Lajos, Mérési eredmények kiértékelésének elmélete és gyakorlata. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1968.
114. I. Gödény, D. L. Beke, F. J. Kedves, G. Groma, *phys. stat. sol. a* 32, 195, 1975.
115. D. L. Beke, G. Erdélyi, F. J. Kedves, *Acta Phys. Chim. Debrecina* 20, 7, 1976.
116. L. C. R. Alfred, D. O. Van Ostenburg, *Phys. Letters* 26A, 27, 1967.
117. G. Erdélyi, Diákköri dolgozat, KLTE Alk. Fiz. Tansz. Debrecen, 1973.
118. G. Serfőző, magánközlés.
119. T. E. Volin, R. W. Balluffi, *phys. stat. sol.* 25, 163, 1968.
120. D. Bergner, *Neue Hütte* 17, 705, 1972.
121. M. Bishop, K. E. Fletcher, *International Met. Rev.* 17, 203, 1972.
122. K. Hirano, S. Fujikawa, *J. Nucl. Mat.* 69—70, 564, 1978.
123. G. Erdélyi, D. L. Beke, F. J. Kedves, I. Gödény, *Phil. Mag.* 38, 445, 1978.
124. D. L. Beke, I. Gödény, F. J. Kedves, G. Erdélyi, *J. Phys. Chem. Solids* 40, 543, 1979.
125. R. Kikuchi, H. Sato, *J. Chem. Phys.* 53, 2702, 1970.
126. A. D. Le Claire, *Prog. Metal. Phys.* (Ed. by B. Chalmers) Butterworths, London, 1949.
127. B. Ja. Pinesz, *Ocserki po metallofizike*, Izd. H.G.U. 1961.
128. D. L. Beke, T. Geszti, G. Erdélyi, *Z. Metallkde* 68/6, 444, 1977.
129. D. L. Beke, G. Erdélyi, *Scripta Met.* 11, 957, 1977.
130. D. L. Beke, I. Gödény, G. Erdélyi, F. J. Kedves, *Second Int. Conf. on Age-Hardenable Al-alloys*, Visegrád, Hungary. 1979.
131. M. Hansen, K. Anderko, *Constitution of Binary Alloys*, 2nd ed., McGraw-Hill Book Co., New York. 1958.
132. C. J. Smithells, *Metals Reference Book*, 3rd. edn. Butterworths. London. 1962.
133. B. Sprusil, V. Valvoda, *Acta Met.* 15, 1269, 1967.
134. D. L. Beke, G. Erdélyi, I. Gödény, F. J. Kedves, *2nd Int. Conf. on Age-Hardenable Al-alloys*, Visegrád, Hungary. 1979.
135. M. Doyama, *Phys. Letters* 21, 395. 1966.

KÖNYVISMERTETÉS

J. M. Gvishiani (ed.): Science, technology and the future
Pergamon Press, 1980

33 szovjet akadémikus áttekinti a kor legjellemzőbb tudományágait, az elért eredményeket, azok szerepét a társadalom fejlődésében, hozzájárulását a globális problémák megoldásához. Tár-
gyalja a fizika, kémia, biológia, geológia, oceanológia mint vezető tudományágak előtt álló fel-
adatokat, az űrkutatás eredményeinek a mindennapi szükségletekben való felhasználását. Átfogóan
elemzi az energia helyzetét, a természettudományok szerepét a Föld népességének élelemmel való
ellátásában, a környezetvédelmi problémákat és mindezek közül a legfontosabbat — a béke meg-
őrzésének kérdését.

Első fejezet: Tudomány a modern világban. Az ismeretek integrálódása (Fedosejev), globális
modellek (Gvishiani), társadalmi kontroll (Afanasyev), közgazdaság és társadalmi haladás (Fedo-
renko), regionális közgazdaság (Nyekrasov), tudományos-technikai forradalom (Mikulinsky),
a nagyenergiájú fizika jövője (Markov), tudomány és humanizmus (I. T. Frolov), tudós és a korszak
(Dollezhal).

Második fejezet: Természet és műszaki tudományok és az emberiség jövője. Energia és fizika
(Kapitza), a világ energiahelyzete (Stirikovich), kémiai kinetika (Semenov), szupravezetés (Ginzburg),
szilárdtestfizika szerepe a tudományban és a gyakorlatban (Prohorov), mechanika (Lavrentiev),
kibernetika (Petrov), űrkutatás (Keldysh—Marov), az óceán (Brekhovskikh), geológia (Sidorenko),
kémiai technológia és ipar (Zhavoronkov), metallurgia és gépipar (Tselikov), kémiai technológia
(Kafarov), biológiai kinetika (Emanuel), az élet alapjelenségeinek kutatása (Engelhardt), az élet
titkának megértése felé (Ovchinnikov), fotoszintézis (Nichiporovich), az automatizálás és az ember
(A. N. Leontyev), orvostudomány és ipari társadalom (Janushkevichius).

Harmadik fejezet: Tudomány és az ekológiai problémák megoldása. A környezet minőségének
monitorozása (Izrael), bioszféra, talaj és ezek megváltozása (Kovda), város-higiénia (V. D. Solovyev—
Schitskova), az ember és környezete (Krotkov), társadalmi haladás és az ekológiai problémák meg-
oldása (Fyedorov).

Nincs fontosabb és sürgetőbb feladat ma, mint megérteni a tudomány struktúráját és főbb
trendvonalainak kölcsönhatásait, feltárni a közös szabályzókat, forrásokat, prerekvizitumokat.
Azt lehet mondani, hogy a természet-, a társadalom- és a műszaki tudományok fokozódó kölcsön-
hatása, harmonikus fejlődése nélkül nem lehet megoldani az előttünk álló nagy feladatokat — mint
a Föld népességének kielégítő táplálását, a környezet védelmét, az energiához, nyersanyaghoz,
vízhez kötődő ismert problémákat, a fertőző betegségek megfékezését. A megoldáshoz vezető úton
különösen fontos a különböző tudományágak határterületeinek kutatása.

A tudományok növekvő kapcsolódásai valamiféle belső összefüggésre utalnak: Az elektromos-
ság és mágnesség fogalmának szintézise és kapcsolata a fény korpuszkuláris természetéhez, a fizika-
kémiai és a kémiai fizika fejlődése és találkozása, a genetika és a darwinista evolúció szintézise,
az öröklés mechanizmusának molekuláris és szub-molekuláris tanulmányozása, a mikro- és makro-
fizika folyamatai, melyek bekerültek a modern kozmológia és asztrofizika kutatásba, és az ember
tanulmányozása a társadalmi és biológiai tudományok kapcsolódásánál — csak néhány, de fontos
mérőjelző a tudományos ismeretek fejlődésében.

Az eredmények általánosításokból adódnak, de természetesen van egy határ, melyen túl már
nem érvényesek. Így pl. az öröklődés törvényszerűségei az élő organizmusok bizonyos körére ter-
jednek ki, de nem érvényesek szervetlen anyagokra vagy a humán társadalom evolúciójára, az osz-
tályok és társadalmi csoportok keletkezésére és viselkedésére. Még a matematikai általánosítás sem
tekinthető univerzálisnak, mivel az mennyiségi kapcsolatok analizésére szorítkozik és nem ad meg-
oldást a filozófia olyan nagy kérdéseire, mint a lét és tudat, alany és tárgy, ember és természet,
természet és társadalom.

Számos elvi kérdés merül fel a további általánosítások során. Ezért bizonyos, hogy gyors sikerekre nem számíthatunk. Ugyanakkor, fel kell figyelni azokra az iskolákra, melyek a „nagy rendszerek” modellezésével foglalkoznak, mert a megszerzett ismeretek itt a lehető legnagyobb mértékben integrálódnak. Az emberiség előtt álló problémák globális természete szükségessé teszi a jövő „globális modellezését”, olyan „scenariók” készítését, melyek kivetítik elénk a társadalmi-gazdasági haladás különböző változatait, lehetséges variánsait. A tapasztalatok tanulságosak, és remény van az ember és természet közötti kölcsönhatás (metabolizmus) harmonikusabbá tételére is.

A tudományos technikai forradalom iránt érdeklődő olvasó elmélyült ismeretekre tehet szert a könyvből.

Nagy Árpád

E. Krause (ed.): Advances in Fluid Mechanics

Proceedings, Aachen, 1980.

Lecture Notes in Physics, 148.

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981. pp. 361

A Lecture Notes in Physics 148. kötete az Aachenben 1980-ban rendezett, a könyv címével azonos témájú konferencia előadásainak a szövegét tartalmazza.

Az aerodinamika (a hidrodinamika) az utóbbi években sok irányban és nagy mértékben elmélyült és fejlődött. A konferencia szervező bizottsága a „bőség zavarában” kénytelen volt a témakört „korlátozni”: biológiai áramlások, inhomogén áramlások, a lökéshullámok és a határreteg kölcsönhatása, a megmaradási egyenletek megoldási módszerei, repüléstechnikai és rakétatechnikai problémák szerepeltek (magas színvonalon) a konferencián.

F. Schultz-Grunov megnyitó beszédén kívül a kötet a következő előadások szövegét tartalmazza:

H. W. Liepmann (Pasadena): Oktatás, gyakorlat és kutatás a műszaki tudományokban;

H. O. Kreiss (Pasadena): A megmaradási törvények numerikus megoldása;

V. Rusanov (Moszkva): Többdimenziós szakadósos áramlás gépi numerikus megoldási módszerei;

L. Ting (New York): Egy örvényfonal mozgásának és lecsillapodásának a vizsgálata;

J. E. Green (Farnborough Hants): Megjegyzések a hidrodinamikai kutatások repüléstechnikai vonatkozásaihoz;

M. Sirieix és J. Détery (Chatillon)—E. Stanewsky (Göttingen): Lökéshullámok és a határreteg kölcsönhatása transzszonikus áramlásban nagy Reynolds-szám esetén;

W. J. Prosnak (Varsó): Áramlás többszörösen összefüggő tartományokban;

R. W. MacCormack (Moffett Field): Kompresszibilis viszkózus folyadékok áramlási alap-egyenleteinek numerikus megoldása nagy Reynolds-szám esetén;

F. X. Wortmann (Stuttgart): Határreteg-hullámok és átmeneti tartományok;

H. Eckelmann (Göttingen): Turbulens nyíró áramlások szemléltetése;

Y. C. Fung (San Diego): Biológiai áramlás deformálható tartályokban;

C. G. Caro (London): Stacionárius anyagtranszport az artéria-falban;

R. Peyret (Nice): Inhomogén folyadékáramlások numerikus vizsgálata.

A könyv minden fejezete rendkívül érdekes és tanulságos; a nagy számú ábra, illetve fénykép mindegyike szemléletes és kiváló.

A recenzius melegen ajánlja a könyvet mindazoknak a kutatóknak, akik az áramlástan bármelyik fejezete vagy alkalmazása iránt érdeklődnek.

A recenzius nem mulaszthatja el annak a megemlékését, hogy Aachenben (vagy talán Európában) az első áramlástan konferenciát 1929-ben Kármán Tódor, az Aerodynamisches Institut der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule akkori igazgatója hívta össze, és hogy a kötet tartalmát képező előadások az intézet Kármán-Auditoriumában hangzottak el.

A konferencián 14 országból több mint 300 kutató vett részt. (A recenziusnak nincs tudomása arról, hogy volt-e a konferenciának magyar résztvevője.)

Szabó János

Benjamin Gal-Or: Cosmology, Physics and Philosophy

Springer, New York, 1981

A „természettudomány” kifejezésnek régen komoly rangja volt: magát a természettudományt értették alatta, és még annál is többet. Ennek a nemes hagyománynak igényes modern folytatója a szerző. Szakértőként használja a mai fizika legmélyebb diszciplínáit: az általános relativitás-elméletet, a mértékmezők elméletét, otthonos a termodinamikában, evolúcióelméletben és a kultur-

históriában (tényanyag, irodalomismeret és matematikai eszközök tekintetében egyaránt). De ami végig foglalkoztatja, való anyagi világunk lényeges alapelveinek, elsősorban az idő irányának megértése. A könyv szinte az egész természettudományt átöleli, de nem az intuitív bevezetést, nema logikus architektúrát kínálja. Egy kiváló egyetemi professzor papírravetett dialektikáját élvezhetjük a vastag könyvben. Dialektikát abban az értelemben is, hogy merész kérdéseket tesz fel, vonzóan elfogult válaszaival pedig vitára ingerel. Ilyen provokatív pl. az a gondolatmenete, amely az idő fizikai szerepének kifejtésében nagyobb szerepet tulajdonít a gravitációnak, mint az entrópiának. Aki követni akarja, legyen otthon az elméleti fizika összes területén, de ha bírja a tempót (nem a számítások, de az enciklopédikus gondolkodás iramát), ritka élvezetben lesz része. Méltányolni fogja azt az epigrammaszerű konklúziót is, amelyben (a termodinamika főtételeiről elmélkedve) egy lábjegyzet keretei között megfogalmazza a Természet játékszabályait:

- I. Főtétel: Nem nyerhetsz a Természettel szemben.
- II. Főtétel: Nem érhetsz el döntetlent a Természettel szemben
- III. Főtétel: Nem léphetsz ki a játékból.

Marx György

S. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park (ed.-s): The Study of Time IV.
Springer, New York—Heidelberg—Berlin, 1981

„Mi az idő?” — ez volt Thomas Mann alapproblémája a Varázshegyben, ez foglalkoztatta Szent Ágostont és Albert Einsteint egyaránt. A görög mitológiában külön istene volt az Időnek. A fizikusok úgy érzik, hogy tudományuk — éppen a világ időbeliségének megragadása révén — ad többet a matematikánál. Ezért vonzó arról értesülni, hogy az Időt Tanulmányozó Nemzetközi Társaság rendszeresen konferenciákat szervez. A IV. ilyen konferencia anyagát tartalmazza ez a kötet.

„Mi az idő?” — úgy látszik, nehéz a kérdésre választ találni. Csak keveseknek sikerült. Sajnos, a konferencia előadói nem jutottak előbbre. Általánosságokat vagy jobb egyetemi hallgatók előtt is ismert tudományos tételeket ismételtek. Talán túl nagy a kérdés ahhoz, hogy rutinszerűen adjunk rá kicsi válaszokat.

Marx György

François Thomasset: Implementation of Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations
Springer Series in Computational Physics, Vol. 5.
Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin 1981

A Kiadó ebben az új sorozatban a számítógépekkel végzett fizikai kutatások több fejezetében nyert újabb eredményeket és módszereket teszi közzé. A jelen kötet a véges elemek módszerének alkalmazását tekinti át a Navier—Stokes-egyenletek problémakörében. A módszer igen sikeresen bevált a mechanikai szerkezetek kutatásában és tervezésében, mert numerikus (gépi) úton tárgyalhatóvá tette az akár igen bonyolult peremfeltételeket is, és irányt adott a matematikailag helyesen feltett problémákra vonatkozó stabil numerikus sémák rendszerének kidolgozására. Ugyanakkor világossá vált, hogy ezt a hajlékonyságot azzal kell megfizetni, hogy a programok bonyolultabbá, a számítás közben raktározandó információ mennyisége nagyobbá vált, mint az a véges differenciák módszerénél tapasztalható volt. A folyadékok mechanikájában a véges elemek alkalmazásában lemaradás volt tapasztalható, ami annak tudható be, hogy a módszert a műszaki gyakorlat vezette be a tervezésbe és a folyadékoknál (gázoknál) fellelő nagy gradienseket a véges hálózat nem tudja eleve helyesen követni. A könyv az összenyomhatatlan folyadékok, a viszkózus Newton-féle folyadékok problémakörére korlátozódik. Főleg kétdimenziós eseteket kísér figyelemmel, de körvonalazza egyes háromdimenziós problémák megközelítését is.

Felépítésében jelentős részt foglal el az ún. advекciós — $(\vec{u} \cdot \nabla) \theta$ típusú — tagoknak a kezelésére szolgáló új eljárás ismertetése, amely a nemfizikai oszcillációk kiküszöbölését meg tudja oldani.

A kötet a Kármán-Intézetben (Belgium) tartott tanfolyam kibővített anyaga.

Abonyi Iván

Norbert Straumann: Allgemeine Relativitätstheorie und relativistische Astrophysik
Lecture Notes in Physics 150
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981

A kötet szerzője 1979-ben Lausanneben egy postgraduális képzési ciklus keretében előadás-sorozatot tartott az általános relativitáselmétről és a relativisztikus asztrofizikáról. Ezeknek az előadásoknak a szövegét tartalmazza a 420 oldalas könyv német nyelven.

A könyv első része az általános relativitáselmélet differenciálgeometriai alapjaival foglalkozik. A második részben az ekvivalencia elvről, az Einstein-féle téregyenletekről, a relativitáselmélet klasszikus bizonyítékairól, a gyenge gravitációs terekről és a Post-Newtoni közelítésről esik szó.

A könyv lényegét a 3. részben találjuk, ahol a relativitáselmélet csillagászati alkalmazásáról esik szó. A *neutroncsillagokról* szóló részben ezek stabilitásáról, a neutroncsillag modellekről, továbbá ezeknek a csillagoknak a kihüléséről olvashatunk. A *forgó fekete lyukak* elméletéről szóló fejezet mindazokat az új eredményeket is tartalmazza, amelyeket ebben a témakörben az elmúlt évtizedben értek. A könyv utolsó fejezete a relativisztikus asztrofizika legújabb és egyben leg-érdekesebb kutatási irányával a *röntgensugárzást kibocsátó kettős rendszerek* fizikájával foglalkozik. Itt szerepelnek — többek között — azok az érvek is, amelyek a Cygnus-X rádióforrás fekete lyuk volta mellett szólnak.

A könyvet igen jól használható irodalomjegyzék egészíti ki, amelyben minden fejezethez a nehány legfontosabb forrásmunka található meg.

A könyv elsősorban tankönyv. Ajánlhatjuk tehát azoknak a fizikus és csillagász kollégáknak, akik a témakörben el kívánnak mélyedni, de ugyanakkor kézikönyvként is használható, hiszen a relativisztikus asztrofizika minden fontosabb eredménye megtalálható benne.

Dr. Marik Miklós

G. Gräff, E. Klempt and G. Werth (ed.-s): Recent Status and Aims of Quantum Electrodynamics
Lecture Notes in Physics Vol. 143.
Proceedings, Mainz, Germany, 1980

A Lamb-féle energiaszint eltolódás és az elektron anomális mágneses momentumának első mérései után a kvantumelektrodinamika jóslatainak egyre pontosabb ellenőrzése állandó kihívás marad a kísérleti fizikusok számára.

Többször fordult elő, hogy a mérés és az elmélet között eltérés mutatkozott, amely élénk vitákat ébresztett a kvantumelektrodinamika fizikai alapjáról és matematikai módszereiről. Azonban a kísérleti pontosság további javítása és magasabb rendű járulékok kiszámolása újra meg újra helyreállította az egyezést a kvantumelektrodinamika elméleti és kísérleti adatai között.

A még meglevő kis eltérések alapján senki sem merné állítani, hogy a kvantumelektrodinamika helytelen elmélet. Azonban mivel a kvantumelektrodinamika érvényessége alapvető kérdés, további még pontosabb mérések és számolások szükségesek. Nagyon hasznos ezért, ha a kísérleti és elméleti fizikusok időről időre összejönnek és megvitatják a kialakult helyzetet. Ilyen konferenciát tartottak 1980-ban Mainzban a „Kvantumelektrodinamika céljai és jelen helyzete” címmel. A kötet a konferencia előadásainak anyagát tartalmazza.

H. Pietschmann előadásában összefoglalja, hogyan illeszkedik be a kvantumelektrodinamika az egyesített térelméleti modellekbe. F. Scheck a lepton kölcsönhatások univerzalitásával foglalkozik. O. Steinmann az elmélet matematikai megalapozottságáról tartott előadást. F. Scheck a kvantumelektrodinamika nagyenergiás kísérleti vizsgálatával foglalkozik. E. Borie és J. Calmet, H. Dehmelt, E. Klempt és F. J. M. Farley az elektron és müon anomális mágneses momentum mérések és számolások eredményeit és egyezését vizsgálja.

Az előadások további része a kötött állapotokon végrehajtott precíziós méréseket és számolásokat ismerteti. E. Borie a kötöttállapotok kvantumelektrodinamikai leírását foglalja össze. P. W. Zitzewitz és E. W. Weber a pozitronium alapállapotára és gerjesztett állapotára vonatkozó eredményeket írja le. H. Orth és L. Tausher a müoniumra és a müonos atomokra vonatkozó jelen ismereteinket tárgyalja. P. S. Faragó és R. Wallenstein a Lamb-féle energiaszinteltolódás jelen helyzetét vizsgálja meg, amely az egyik legalapvetőbb jóslata a kvantumelektrodinamikának. R. Neumann a héliumszerű rendszerekre hasonlítja össze a kísérleteket az elméleti jóslatokkal. B. Fricke a nehéz atomok és H. Backe az ion-atom ütközésekben keletkező pozitronokat vizsgálja előadásában.

A kötet fontos támpontot nyújt a fizikus olvasó számára bemutatva a kvantumelektrodinamika kísérleti és elméleti eredményeit. Megtanulhatjuk, hogy a kísérleti eredmények egyezése az elméleti számolásokkal a mai napig kiváló. További kísérletek szükségesek azonban, amelyek egyre komolyabb technikai problémát jelentenek. A könyv jó áttekintést nyújt a fizikus alapműveltséggel rendelkező olvasó számára.

Horváth Zoltán

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1982. április 19. — Terjedelm: 7 (A/5 ív)

82-1973 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Beke Dezső: ^{65}Zn diffúziója híg alumínium ötvözetekben</i>	93
--	----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>J. M. Gvishiani (ed.): Science, Technology and the Future</i>	167
<i>E. Krause (ed.): Advances in Fluid Mechanics</i>	168
<i>Benjamin Gal—Or: Cosmology, Physics and Philosophy</i>	168
<i>S. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park (ed.-s): The study of Time IV</i>	169
<i>François Thomasset: Implementation of Finite Element Methods for Navier—Stokes Equations</i>	169
<i>Norbert Straumann: Allgemeine Relativitätstheorie und relativische Astrophysik</i>	170
<i>G. Gräff, E. Klempt and G. Werth (ed.-s): Recent Status and Aims of Quantum Electrodynamics</i>	170

307.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

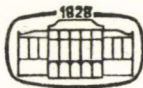
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóirattfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KVÁZI-EGYDIMENZIÓS VEZETŐK ELMÉLETE*

SZÉPFALUSYNÉ MENYHÁRD NÓRA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	171
I. Egydimenziós vezető rendszerek	175
1. Az egydimenziós elektrongáz Bücskov, Gorkov, Dzsalsinszkij-féle modellje	175
2. A multiplikatív renormálási csoport módszer alkalmazása a BGD-modellre	179
2.1. Elsőrendű renormálási csoport közelítés	181
2.2. Másodrendű renormálási csoport közelítés	184
2.3. A renormálási csoport módszer alkalmazása a BGD-modellre a többváltozós esetben	187
3. A BGD-modell rezonzfüggvényeire vonatkozó ismeretek összefoglalása	191
4. Egzakt megoldás az $n \rightarrow \infty$ határesetben	194
II. Csatolt láncok rendszere — kvázi-egydimenziós vezetők	200
1. Gorkov—Dzsalsinszkij-modell csatolt vezető rendszerek fázisátalakulásának leírására	200
2. A multiplikatív renormálási csoport módszer alkalmazása a Gorkov—Dzsalsinszkij-modellre	201
2.1. Általánosított, a láncok közötti kölcsönhatásban elsőrendű renormálási csoport közelítés	201
2.2. 1D—3D átmenet (crossover)	205
2.3. Spinsűrűség-hullám korrelációk gyengülése a Peierls-átmenet közelében	206
3. Kvázi-1D vezetők általánosított Landau- és Ginzburg—Landau-elmélete	209
3.1. A szabadenergia levezetése és MF-elmélet	209
3.2. Általánosított Ginzburg—Landau-elmélet	213
3.3. Fluktuációk perturbációs kezelése és a Ginzburg-kritérium	216
3.4. A fajhő, t_{ero} és t_G kísérleti értékekkel való összevetése	218
3.5. Az állapotsűrűség	220
III. Szennyezések hatása 1D és kvázi-1D vezető rendszerekre	222
1. Tapasztalati tények TTF—TCNQ-ra a magashőmérsékleti fázisban és az 53 K-es fázisátalakulás környezetében	222
2. Az általánosított Ginzburg—Landau-elmélet paraméterei szennyezések jelenlétében	225
3. T_{ero}, T_G és az elektron állapotsűrűség-koncentráció függése	229
4. Ellenállás az 1D és 3D fluktuációs tartományokban	231
Összefoglalás	234
Irodalom	236

BEVEZETÉS

A kvázi-egydimenziós vezetők valójában háromdimenziós objektumok, melyek viselkedésében azonban szálszerű összetevőik egyes alapvető, jellegzetesen egydimenziós (1D) tulajdonságai manifesztálódnak. Ez a körülmény indokolja azt az érdeklődést, mely az utóbbi 8—10 évben olyan kvázi-1D vezetők, mint a TTF—TCNQ

* Érkezett 1981. június 28.

és sok más szerves és nem szerves vegyülettársa iránt megnyilvánult mind kísérleti, mind pedig elméleti vonalon.

A kísérletek megmutatták, hogy ezek az anyagok magasabb hőmérsékleteken fémes vezetőképeséggel rendelkeznek, melynek anizotrópiája igen nagy és hőmérsékletfüggése jellegzetes alakú [1]. A vezetőképeség csökkenésével együtt, pontosabban dp/dT (p az ellenállás, T a hőmérséklet) maximumának megfelelő hőmérsékleten fázisátalakulás megy végbe, mely sajátosan 1D karakterű és dielektromos állapotba vezeti át a rendszert. Ez az ún. Peierls-átmenet [2], melyet rácsorzulás és elektron sűrűség hullámok (CDW) kialakulása jellemez és fononmódus lágyulása kíséri [3]. Megmutatkozik anomália a fahőben [4] is, a megfelelő csúcs azonban eléggé elmosódik a nagy háttérben.

Az elméleti fizikus számára ez a fázisátalakulás az érdeklődés fő forrása, hiszen 1D fluktuációs jelenségek, ill. a szokásos 3D rendszerektől idegen kollektív módusok tanulmányozására nyújt lehetőséget.

Hogy megérthessük a jelenség lényegét, először a szigorúan 1D vezető rendszer elméleti vizsgálatára van szükség. Nem eldöntött kérdés, hogy az elektrongázban ható elektron-elektron kölcsönhatások, vagy pedig az elektron-fonon kölcsönhatás játsza-e a főszerepet az instabilitások kialakításában. Ennek megfelelően azután az elméleti megközelítések a kiinduló modell megválasztásától függően két csoportba sorolhatók. Egyik oldalról a *Fröhlich—Hamilton*-operátoron [5] alapulnak a számítások [1, 6—8]; az elektron-fonon kölcsönhatás fontos dinamikai jelenségek, mint a már említett fonon lágyulás okozója. Ugyanakkor a fononos formalizmus keretében az elektronkorrelációk pontos figyelembevétele nem megoldott. Az elektrongázban lejátszódó jelenségek tanulmányozására nyújt elsősorban lehetőséget a másik megközelítés, melynek alapja a kölcsönható elektron-rendszer Hamilton-operátora. Ez tulajdonképpen az elektron-fonon kölcsönhatás egy részét is magába tudja foglalni egy effektív, vonzó, elektron-elektron kölcsönhatás révén, akárcsak a szupravezetés BCS-modelljében. Kiemelkedő jelentőségűnek bizonyult a *Bücskov, Gorkov és Dzsalsinszkij* (BGD a továbbiakban) által 1966-ban bevezetett modell [9], melyet a szerzők a magashőmérsékleti szupravezetés lehetőségének felmerülése kapcsán javasoltak. A BGD-modell keretében ugyanis a szupravezető állapottal együtt a $2k_F$ -es (k_F a Fermi-impulzus) sűrűség hullám-állapot is természetes módon megjelenik.

A modell megoldását célzó próbálkozások egy része perturbatív jellegű. Itt elsősorban említendő az eredeti BGD-cikkben szereplő, az ún. parketta típusú gráfoknak csatolt nemlineáris integrálegyenletek megoldása révén való felösszegezésével nyert eredmény, mely azonban nemfizikai fázisátalakulást mutat véges hőmérsékleten. Nyilvánvaló volt [10], hogy ez a közelítés elégtelenségének a következménye és később a multiplikatív renormálási csoport Lie-egyenleteinek [11, 12] alkalmazása révén sikerült olyan, magasabb rendű járulékokat is figyelembe vevő eredményt kapni, mely mentes volt az említett szingularitástól [13, 14]. Rövidesen megszületett a modellnek egy egzakt megoldása is [15]. A megoldás a bozonreprezentáció elméletén alapul, nem perturbációs, azonban csak a csatolási állandók bizonyos, speciális választásánál létezik. Fontos lépés volt a perturbációs eljárások és az egzakt megoldás eredményeinek összekapcsolása [16]; ezek együtteséből ma már egy közel teljes képet sikerült kialakítanunk a modell által megjósolt instabilitások természetrajzáról. Tudjuk, hogy a modell paramétereinek nagyságától és előjelétől függően $2k_F$ -es sűrűség hullám, $2k_F$ -es spinsűrűség-hullám és szupravezető típusú instabilitás

kialakulása lehetséges zérus hőmérsékleten; a fluktuációkat jellemző χ_{1D} válaszfüggvény $(T/T_{1D})^{-7}$ alakú alacsony hőmérsékleteken, ahol a kitevő a modell csatolási állandóinak függvénye és T_{1D} a korrelációk felerősödését jellemző karakterisztikus hőmérséklet.

Az 1D láncok rendszerének fázisátalakulása azonban véges hőmérsékleten következik be és ezért a gyengén csatolt rendszer ténylegesen 3D volta a felelős. Egyes szerzők a rendszer háromdimenziós jellegét úgy veszik figyelembe, hogy feltételezik, hogy az elektron vagy fonon diszperzió a láncok irányára merőleges komponenssel is rendelkezik [7, 17, 18], míg mások a kölcsönhatásban tételeznek fel járulékos, a láncok között ható tagokat [19–23]. A láncok közötti elektron hopping szupravezető fázisátalakulásnak kedvez, míg egy, a sűrűségek között csatolást létesítő Coulomb-típusú kölcsönhatás Peierls-átmenetet eszközöl. Minden jel szerint az utóbbi dominál, hiszen a megfigyelt átmenetek Peierls-típusúak [1]. Csak a legutóbbi időben adtak hírt egy olyan eseményről, miszerint igen alacsony hőmérsékleten nyomás hatására a $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ rendszer Peierls-átmenet helyett egyszerre csak szupravezető átmenetet szenved [24].

További érdekes és általános jelenség a vezetőképesség jellegzetes hőmérsékletfüggése. Nevezetesen a fázisátalakulási pont felett nagy maximum mutatkozik, felette a magashőmérsékleti viselkedés a kísérletek szerint a $p=p_0+p_1T^{2,3}$ összefüggéssel írható le (itt p az ellenállás). A kitevő TTF—TCNQ-ra vonatkozik, értéke valamelyest változik anyagról anyagra, de az általános kép marad. A $T^{2,3}$ -os függés elmélete nem tisztázott. Egyesek szerint ez kooperatív effektus, kollektív módustól származik, míg mások egy-elektron jelenséggént próbálják interpretálni, mint közösleges fémekben, és mindkét nézetre vonatkozóan vannak eléggé meggyőző érvek. T_c közelében, a maximum alsó oldalán, erősen csökken a vezetőképesség és $-dp/dT$ jellegzetes maximumot mutat T_c -n. Erre vonatkozóan már egységesebb nézet alakult ki: CDW-fluktuációk hatásának tulajdonítják. Csak az a kérdés maradt nyitva, hogy mennyiben egy- vagy háromdimenziósak ezek a fluktuációk.

Erre a kérdéskörre vonatkozóan is sok új, értékes információt hoztak azok a kísérletek, amelyek TTF—TCNQ-ban besugárzással, kontrollált módon, létrehozott rendezetlenség hatását vizsgálták [25, 26]. Különböző mennyiségek szennyezéskonzentrációtól való függésének tanulmányozása révén a $T > T_c$ fázisban alátámasztást nyert egy olyan fluktuációs kép [26, 27], mely szerint magasabb hőmérsékleteken az 1D korrelációk még eléggé tisztán érvényesülhetnek és csak a láncok közötti kölcsönhatás erősségével megszabott átalakulási pont közelében lépnek fel 3D jellegű fluktuációk.

Maga a fázisátalakulás a különféle szennyezések hatására nem tökéletes és az alacsony hőmérsékleti fázisban kialakuló sűrűség hullámok a szennyező centrumokon lekötődnek (pinning) [1]. A T_c alatt létrejövő fázis tulajdonságai nagyon érdekesek, kiterjedt irodalom foglalkozik velük [28–30], azonban a jelen munka tárgyát nem képezik és így a továbbiakban nem esik szó róluk. Hasonló vonatkozik az egyes szerves vezetőkben megmutatkozó több fázisátalakulás problematikájára is. Ismeretes például, hogy TTF—TCNQ-ban az 53–35 K tartományban három fázisátmenet zajlik le. Ez szorosan kapcsolatos az említett szervesvezető struktúrájával: donor- és akceptor láncokból való felépítettségével és azokon a CDW-állapot több lépésben való kialakulásával [1].

Hangsúlyoznunk kell, hogy a kvázi-ID vezetőkben tapasztalt jelenségek értelmezésére egységes, minden szempontból kielégítő és kvantitatív leírást adó elmélet

nem létezik. Ennek oka egyrészt az, hogy a szóban forgó anyagok igen bonyolult szerkezetűek és másrészt az őket jellemző fizikai paraméterek (sávszélesség, Coulomb-kölcsönhatás erőssége stb.) értékei olyanok, hogy bármely szokásos leírás az érvényességi tartományának határán kerül alkalmazásra. Így lehetséges azután, hogy az irodalomban egyaránt találkozhatunk olyan interpretációkkal, melyek a lánc elektromonjai szabadnak, ill. lokalizáltak tételezik fel.

Természetesen merült fel az a gondolat, hogy olyan elméletet dolgozzunk ki, mely a tapasztalati tények közül a legalapvetőbbeket és legáltalánosabbakat: az 1D fluktuációkat, a fázisátalakulást és a fázisátalakulási pont környezetében érvényesülő fluktuációs jelenségeket egységes keretben interpretálja. A modellizálás érdekében a fizikai paraméterek nagy sokaságából néhány, a probléma szempontjából leglényegesebb, megtartására kényszerülve, eltekintettünk a molekula- és rács-szerkezettől, a szálak közötti elektron-hoppingtól, a fononok és egyéb gerjesztések explicit figyelembevételétől stb. és a magát az elektrongázt is csak néhány paraméter (Fermi-energia, előreszórási és hátraszórási csatolási állandók, láncok közötti kölcsönhatás csatolási állandója) segítségével jellemző Gorkov—Dzsalosinszkij-modellt [19] választottuk kiindulásul. Egy ilyen modell szükségképpen rendkívül erős leegyszerűsítésben tükrözheti csak az eredeti fizikai rendszert. Ennek dacára a kölcsönhatások lényegesen anizotróp jellegét felhasználó közelítés kidolgozásával sikerült nemcsak kvalitatív, hanem szemi-kvantitatív (azaz nagyságrenden belüli egyezéssel elmélet és kísérlet között) leírását adni a fent vázolt problémakörnek. A jelen dolgozat tárgyát ezen elmélet leírása és a tapasztalati anyaggal való összevetése képezi legnagyobb részben.

A dolgozat felépítése a következő:

Az I. fejezet foglalkozik az 1D rendszer problémájával, az 1D elektrongáz BGD-modelljének keretében. A modellt és a BGD-megoldást [9] ismerteti az I.1. pont. Az I.2. pont a szerzőnek a multiplikatív renormálási csoport módszer segítségével végzett, Sólyom Jenővel közös számításait tartalmazza. Az I.2.2. alpontban az ún. másodrendű renormálási csoport közelítésben megmutatjuk, hogy a BGD-megoldás szingularitása magasabb rendű járulékok figyelembevételének eredményeképp eltűnik [13], míg az I.2.3. alpont a parkettaközelítés és a multiplikatív renormálási csoport módszer elsőrendű közelítésének kapcsolatát vizsgálja a többváltozós esetben [31]. Az I.3. pont irodalmi összefoglalója a BGD-modell rezonzfüggvényeire vonatkozó, részben az előző pontban leírt multiplikatív renormálási csoport számítások alapján és folytatásaként végzett kutatásoknak [15, 16, 32]. Az I.4. pontban ismertetjük a szerző vizsgálatait a BGD-modell egy általánosított formáját illetően. Az általánosítás lényege, hogy az elektronokhoz fiktív szabadsági fokokat rendelünk (komponens-index), melyek száma végtelenhez tarthat, és ebben a limitben a rendszer egzakt átlagtér (MF) jellegű fázisátalakulást szenved. Az elvi kérdések érdekességén túlmenően a modell jó átvezetést jelent a csatolt láncok 3D problémájához [20].

A II. fejezetben a csatolt láncok rendszerének leírására kerül sor. A BGD-modell kiegészítése a láncok között ható Coulomb-típusú kölcsönhatással — ez a Gorkov—Dzsalosinszkij-modell [19] lényege, melyet a II.1. pontban ismertetünk. A szerző ezt a Hamilton-operátort használta oly módon írva át, hogy az egy-lánc probléma és a láncok közötti kölcsönhatás szeparálódjék és a továbbiakban olyan elméletet dolgozott ki egyrészt a multiplikatív renormálási csoport módszer segítségével [23] (II.2. pont), másrészt a Ginzburg—Landau-formalizmusban [33] (II.3. pont), mely alapvetően kihasználja, hogy a láncban belüli korrelációk lényegesen erősebbek,

mint a láncköztiek. Ennek megfelelően az egy-lánc probléma a lehetőséghez mérten egzaktul van kezelve, míg a csatolás az 1D objektumok között átlagtér (MF) közeli-
lésben. Az így adódó általánosított MF-elmélet természetes módon tükrözi a rendszernek egydimenziósból három dimenziósba való váltását (1D—3D crossover), amint a hőmérséklet csökken. A TTF—TCNQ 53 K-es fázisátalakulásának környezetében tapasztalható fluktuációs jelenségeket az általánosított Ginzburg—Landau-elméletünk keretében interpretáljuk [34] és mind a fajhőadatokból leolvasható Ginzburg-hőmérsékletet (T_G), mind az 1D—3D crossover hőmérsékletét (T_{cro}) elméletünkkel szemikvantitatív egyezésben levőnek találjuk (II. 3.4. alpont). Ugyan-ezen fluktuációs elmélet keretében a Fermi-nívónál vett elektron állapotsűrűség közelítő számítását adjuk a II.3.5. alpontban [34]. Azt találjuk, hogy ez csak egy a T_c körüli igen keskeny hőmérséklettartományban mutat 1D és 3D fluktuációs (kollektív) eredetű álhézagot (pseudogap-et) és ezáltal további támpontot szolgáltatunk azon nézetekhez, melyek szerint a frekvenciafüggő vezetőképesség adatokban található anomália, a kísérletezők véleményével ellentétben, nem pseudogap-tól származik [35, 36].

A III. fejezetben szennyezések hatását vizsgáljuk a BGD-moddal leírt 1D Fermi-gáz rendszere és a láncok közötti kölcsönhatás révén összekapcsolt kvázi-1D vezető rendszere a $T \gtrsim T_c$ tartományban [27]. A III.1. pont bizonyos interpretálásra kerülő kísérleti tényeket foglal össze. A III.2. pontban az egydimenziós rendszer CDW-válaszfüggvényének szennyezések miatti módosulását diszkutáljuk, majd a Ginzburg—Landau-elmélet paramétereinek ezen keresztül való változását adjuk meg. A „crossover” hőmérséklet, a Ginzburg-hőmérséklet és az elektron állapotsűrűség koncentrációfüggésére a tapasztalattal összehasonlítható kijelentéseket teszünk (III.3.). Az ellenállás fluktuációs járulékának a jelen elmélet keretében való kiszámítása után meghatározzuk a vezetőképesség maximumának hőmérsékletét és más paramétereket és ezeket a III.1. pont kísérleti adataival jó egyezésben levőnek találjuk.

I. EGYDIMENZIÓS VEZETŐ RENDSZEREK

1. Az egydimenziós elektrongáz BGD-modellje

Egydimenziós vezető rendszerek elméleti vizsgálata, különösen a *Bückov*, *Gorkov* és *Dzsalosinszkij* [9] nevéhez fűződő (BGD a továbbiakban) Fermi-gáz modell keretében, a magashőmérsékleti szupravezetés lehetőségének felmerülése kapcsán indult el nagy intenzitással. Addig az egydimenziós (1D) modellek inkább matematikai érdekességük, megoldhatóságuk révén szerepeltek az irodalomban, de tényleges fizikai rendszerekkel való szorosabb kapcsolatuk nem jöhetett számításba. És bár a magas hőmérsékleti szupravezetés mindmáig megvalósíthatatlan maradt, az 1D Fermi-gáz modellnek egy új kutatási területe, a kvázi-1D vezetők fizikájának felderítése kapcsán újra nagy jelentősége lett. Ennek oka a következő. *Peierls* [2] munkájából ismeretes, hogy egydimenziós nem teljesen betöltött sávval rendelkező fém zérus hőmérsékleten instabil egy olyan fázisátmenettel szemben, melyben a rács periódusa megváltozik és a megfelelően módosult sávban a Fermi-energiánál az elektronok energiaspektrumában energiahézag alakul ki. Ez az instabilitás az elektrongázban $2k_F$ -es töltéssűrűség-hullámok (CDW) kialakulását vonja maga után, mely alapvető a fázisátalakulás és egyéb jelenségek szempontjából. Ezért ha a strukturális

aspektusoktól eltekintünk, akkor elegendő a rendszert mint elektrongáz vizsgálni és a fononok hatását effektív elektron-elektron kölcsönhatásként figyelembe venni. A BGD-modell, mely valójában a szupravezetés BCS-modelljének 1D változata, a legegyszerűbb modell a kölcsönható elektrongáz tárgyalására és a CDW-instabilitás természetes módon jelenik meg benne a Cooper-típusú fluktuációk mellett, annak következményeképp, hogy 1D-ban a Fermi-felületnek nincs görbülete.

Térjünk most rá a BGD-modell matematikai megfogalmazására. A modell Hamilton-operátora két tagból áll:

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (\text{I.1.1})$$

ahol

$$H_0 = \sum_{k\alpha} \varepsilon_k a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha} \quad (\text{I.1.2})$$

az elektronok kinetikus energia-operátora és

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2L} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha, \dots, \delta} g(k_1, \dots, k_4) a_{k_1\alpha}^+ a_{k_2\beta}^+ a_{k_3\gamma} a_{k_4\delta} \quad (\text{I.1.3})$$

a kölcsönhatási Hamilton-operátor. A modell a rács periodikus terét figyelmen kívül hagyja. (I.1.2), (I.1.3)-ban $a_{k\alpha}^+$ k impulzusú és α spinvetületű elektront keltő operátor, ε_k az elektron kinetikus energiája és L a normálási hosszúság:

$$L^{-1} \sum_k \rightarrow (2\pi)^{-1} \int dk.$$

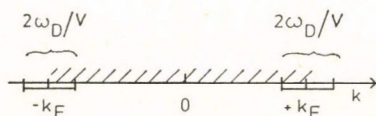
Az elektrongáz viselkedését döntő módon azon elektronok befolyásolják, melyek a Fermi-szint közelében helyezkednek el. Az egydimenziós esetben a Fermi-felület a $\pm k_F$ -es pontpárból áll (1.1. ábra).

A kinetikus energia $\pm k_F$ környezetében linearizálható:

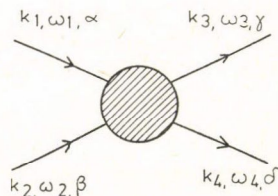
$$\varepsilon_k \simeq v(|k| - k_F). \quad (\text{I.1.4})$$

Itt v a Fermi-sebesség. Az 1. ábrán berajzoltuk azt a $2\omega_D/v$ szélességű tartományt a Fermi-felület környékén, mely fontos szerepet játszik a rendszer viselkedésének meghatározásában, így a $g(k_1, \dots, k_4)$ kölcsönhatás is ezen tartományban számottevő, azon kívül zérusnak tekinthető. Lényeges feltevés az is, hogy $\omega_D \ll E_F$, ahol E_F a Fermi-energia.

A $\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}(k_1\omega_1, \dots, k_4\omega_4)$ vertex (2. ábra) 3 független impulzus- és három független frekvenciaváltozótól függ, ezeket $k_1+k_2, k_3-k_1, k_4-k_1$ és $\omega_1+\omega_2, \omega_3-\omega_1, \omega_4-\omega_1$ -nek választjuk. Az energia- és impulzusmegmaradás értelmében $k_1+k_2 = k_3+k_4, \omega_1+\omega_2 = \omega_3+\omega_4$.

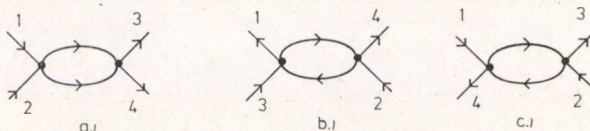


1. ábra



2. ábra

Melyek lesznek egy g -szerinti perturbációs számításban a legdöntőbb (leg-szingulárisabb) járulékok? Meghatározásukhoz elegendő egyetlen energiaváltozóval dolgozni, az impulzusváltozók megfelelő rögzítése mellett. Ez a következőképpen történik. Tekintsük a másodrendű vertexkorrekciókat; diagramok segítségével ábrázoljuk őket a 3. ábrán.



3. ábra

a)-t Cooper-buboréknak nevezik és járuléka a $k_1 + k_2$, $\omega_1 + \omega_2$ változóktól függ logaritmikusan, feltéve, hogy $v(k_1 + k_2)$, $\omega_1 + \omega_2 \ll \omega_D$ teljesül.

b) az ún. Peierls-buborék; ez $v(k_3 - k_1)$, $\omega_3 - \omega_1$ -től függ logaritmikusan, ha $|k_3 - k_1| \simeq 2k_F$ és $\omega_3 - \omega_1 \simeq 0$.

c) járuléka elhanyagolható abban az esetben, amikor a változók olyanok, hogy az a) és b)-nél megadott feltételek teljesülnek. Ekkor ugyanis $k_4 - k_1 \simeq 0$ és c) járuléka nem szinguláris.

Mindezeknek megfelelően a vertex változóinak egy lehetséges megválasztása a következő:

$$k_1 = -k_F, \quad k_2 = k_F, \quad k_3 = k_F, \quad k_4 = -k_F,$$

$$\omega_1 = \frac{3}{2} \omega, \quad \omega_2 = -\frac{1}{2} \omega, \quad \omega_3 = \frac{1}{2} \omega, \quad \omega_4 = \frac{1}{2} \omega.$$

Bücskov, Gorkov és Dzsalsinszkij szerint az (I.1.3)-ban szereplő kölcsönhatási mátrix egy igen leegyszerűsített formáját használhatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy a logaritmikusan szinguláris vertex járulékok olyanok, hogy egy $+k_F$ -es elektronnak egy $-k_F$ -es elektronon való szórási folyamatát írják le. $+k_F(-k_F)$ -es elektronnak $+k_F(-k_F)$ -es elektronon való szórásának járuléka a vertexekhez elhanyagolható. Továbbá, mint már említettük, csak a k_F körüli ω_D/v kiterjedésű sávban érvényesülnek a folyamatok, ezen sávban a modell az impulzusfüggésektől eltekint és a mátrixelemeket, akárcsak a szupravezetés BCS-modelljében, konstansoknak tetelezi fel. Ezek után két kölcsönhatási állandó, g_1 és g_2 jellemzi $g(k_1, \dots, k_4)$ -et a következő meghatározással:

$g(k_1, \dots, k_4) = g_1$, ha $k_1, k_2(k_F + k_D)$ és $(k_F - k_D)$ közé és ugyanakkor $k_3, k_4(-k_F - k_D)$ és $(-k_F + k_D)$ közé esik. Hasonlóan a $k_1, k_3 \rightleftharpoons k_2, k_4$ szerepcserével.

$g(k_1, \dots, k_4) = g_2$, ha $k_1, k_4(k_F + k_D)$ és $(k_F - k_D)$ közé, valamint $k_2, k_3(-k_F - k_D)$ és $(-k_F + k_D)$ közé esik.

$k_1, k_4 \rightleftharpoons k_2, k_3$ cserével ugyanez a helyzet. Itt $k_D \equiv \omega_D/v$.

A Hamilton-operátort az egyszerűsített kölcsönhatással most már így írhatjuk:

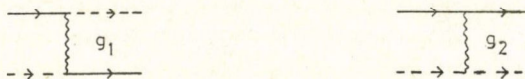
$$H = H_0 + \frac{1}{L} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} [g_1 a_{k_1\alpha}^+ a_{k_2-2k_F\beta}^+ a_{k_3\beta} a_{k_4-2k_F\alpha} +$$

$$+ g_2 a_{k_1\alpha}^+ a_{k_2-2k_F\beta}^+ a_{k_3-2k_F\beta} a_{k_4\alpha}]. \quad (\text{I.1.5})$$

ahol minden k_1, k_2, k_3, k_4 pozitív. Ezzel az elemi vertex alakja a következő lesz:

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(0)} = g_1 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - g_2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}.$$

A g_1, g_2 elemi vertexeket a 4. ábra mutatja grafikususan. Itt összefüggő vonallal jelöljük a $+k_F$ közelébe eső elektronok Green-függvényét, szaggatott vonallal pedig a $-k_F$ -es elektronokét.



4. ábra

A két perturbálatlan Green-függvény megegyezik egymással:

$$G_0^{(\pm)}(k, \omega) = G_0(k, \omega) = [\omega - \varepsilon(k) + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon(k)]^{-1}. \quad (\text{I.1.6})$$

Az eredeti BGD-modell a $g_1 = g_2 \equiv g$ választásnak felel meg. $g_2 = 0$ valósítja meg a fonon-közvetítette elektron-elektron kölcsönhatás esetét: g_1 olyan folyamatot jellemez, amelyben az elektron impulzusátadása $2k_F$ és éppen ez a mátrixelem nagy és vonzó jellegű az elektron-fonon kölcsönhatás érvényesülésének körülményei között.

Bücskov, Gorkov és Dzsalosinszkij felismerték [9], hogy a 3.a és 3.b ábrákon látható típusú, logaritmikus járuléku diagramok magasabb rendekben összekombinálódnak, és egy speciális diagram-osztály, az ún. parketták felösszegezése válik szükségessé. A parkettagráfok, melyek $g^n (\ln x)^{n-1}$ -gyel arányos járulékot adnak Γ -hoz, azáltal definiálhatók, hogy mindig két részre ejthetők szét két logaritmikus integrálást hordozó, belső vonal átvágásával.

Ezen diagram-osztály felösszegezését nemlineáris integrálegyenletek megoldásának problémájára vezették vissza. Végeredményül azt kapták, hogy a vertex

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} = g \frac{\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}}{1 - \frac{g}{\pi v} \ln x} + \frac{g^2}{2\pi v} \ln x \frac{\delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}}{1 - \frac{g}{\pi v} \ln x}, \quad (\text{I.1.7})$$

ahol x az $\omega/\omega_D, vq/\omega_D$ és T/ω_D energia, impulzus, illetve hőmérsékletváltozók közül a legnagyobb. $g < 0$ esetén (I.1.7) az 1D Fermi-rendszer instabilitását mutatja $x = x_c$ -nél, ahol x_c az

$$1 = \frac{|g|}{\pi v} |\ln x_c| \quad (\text{I.1.8})$$

egyenlőséggel adott. Ha $\omega = q = 0$, akkor $x_c = k_B T_c / \omega_D$ és

$$T_c = \omega_D \exp(-\pi v / |g|) \quad (\text{I.1.9})$$

a BCS-elméletből jól ismert alakú fázisátalakulási hőmérséklet. A kapott instabilitás azonban nem fizikai, hiszen Landau jól ismert tétele értelmében rövid hatótávolságú erők hatásának kitett 1D rendszerben zérustól különböző hőmérsékleten fázisátalakulás nem lehetséges. A parkettaközelítésben kapott instabilitás valójában a közelítés elégtelenségének jele, ha $g < 0$. Éppen ezért felmerült annak szükséges-

sége, hogy magasabb rendű járulékok figyelembevétele révén a modell pontosabb megoldását keressük.

A BGD-modell az ún. logaritmikus problémák sorába tartozik. Ez azt jelenti, hogy a soktestproblémái tárgyalás alapvető mennyiségeinek (vertex függvény, saját-energia stb.) perturbációs sora $g^n (\ln x)^m$ alakú kis x -ekre. A parkettaközelítés, vagy vezető logaritmikus közelítés pl. a vertexet illetően egy $g + ag^2 \ln x + bg^3 \ln^2 x + \dots$ részsor felösszegezését eszközli. Következő rendben a $g^n \ln^{n-2} x$ típusú járulékkal rendelkező gráfosztályt is számításba kell venni. Erre a következő pontban ismertetendő multiplikatív renormálási csoport az eredeti BGD-félénél lényegesen könnyebben kezelhető eljárást kínál.

2. A multiplikatív renormálási csoport technika alkalmazása a BGD-modellre

A multiplikatív renormálás és renormálási csoport a kvantum-térelméletben évtizedek óta alkalmazott módszer divergenciák megszüntetésére. Ezekhez hasonló, ultraibolya-típusú divergenciák szilárdtest-fizikában nem lépnek fel, minthogy létezik egy természetes levágás nagy impulzusoknál: a rácsállandó reciproka.

Van azonban a multiplikatív renormálási csoportnak (m.r.cs. a továbbiakban), egy másik alkalmazási lehetősége is: bizonyos feltételek mellett magasabb rendű gráfjárulékok határozhatók meg néhány alacsonyabb rendű gráf járulékanak az ismeretében a renormálási csoport ún. Lie-differenciálegyenleteinek a segítségével. Ezt az eredetileg *Gell-Mann és Low* [11]-től származó eljárást a szilárdtest-fizikában először *Boncs-Brujevis és Tyablikov* [37] alkalmazta töltésárványkolás leírására. Itt a *Wilson* [41] nevéhez fűződő, a multiplikatív renormálás módszerétől szellemében is lényegesen különböző, renormálási eljárásra nem fogunk kitérni.

A hetvenes évek elején egy sor fizikai probléma [38–40] vizsgálata kezdődött meg a m.r.cs. módszer segítségével, így az itt tárgyalásra kerülő BGD egydimenziós elektrongáz modell is. A vizsgált modellek egy csoportjának általános jellemzője, hogy ún. logaritmikus problémák; ennek jelentéséről az előző pontban már volt szó. Ezekre az eredeti m.r.cs. módszer egy lényegesen leegyszerűsített, bár kevésbé általános válfaja alkalmazható [13, 42]. Ennek lényegét írjuk le a következőkben.

A Green-függvények és vertexek perturbációs sorának legalacsonyabb rendű tagjait szemügyre véve látható, hogy a fizikai jelentéssel bíró ω_D levágási paraméter ω_D -re való változtatásával egyidejűleg a csatolási állandók megfelelő módosítását végrehajtva a Green-függvények és vertexek állandókkal szorozódnak. Ezek az állandók függhetnek az eredeti csatolási állandóktól és levágástól, függetlenek viszont a frekvencia- és impulzusváltozóktól. Ez azt jelenti, hogy a levágási energia természetes skálaparamétere az elméletnek — legalábbis a vizsgált rendig. A módszer alapfeltevése, hogy ez a tulajdonság a levágásnál sokkal kisebb impulzusok, illetve energiák tartományában is érvényes.

A skálázásos multiplikatív renormálási módszer matematikai megfogalmazása mármost a következőképpen történik. Tekintsünk kölcsönható elektrongázt és jelöljük az elektronok egyrészcsekés Green-függvényét $G(k, \omega)$ -val és a vertexfüggvényét $\Gamma(k_1, k_2, k_3, k_4, \omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$ -gyel. Az egyszerűség kedvéért egyelőre szorítkozunk egyetlen g -vel jelölt csatolási állandó esetére, ez jellemzi az elektronok közötti kölcsönhatást, és rögzítsük a változókat is valamilyen módon úgy, hogy csak

egyetlen energiaváltozó, ω , maradjon (lásd I.1. pontot) és a spinváltozókról is feledkezzünk el. $G(\omega)$ -t és $\Gamma(\omega)$ -t írjuk a következő módon

$$G(\omega) = d\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right) G_0(\omega), \quad (\text{I.2.1})$$

$$\Gamma(\omega) = g\tilde{\Gamma}(\omega), \quad (\text{I.2.2})$$

ahol $G_0(\omega)$ a kölcsönhatásmentes rendszer Green-függvénye. ω_D -t ω'_D -re változtatva és szimultán a csatolási állandót g -ről g' -re módosítva, a multiplikatív renormálhatóság a következő egyenletekkel fejezhető ki

$$d\left(\frac{\omega}{\omega'_D}, g'\right) = Z_d d\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right), \quad (\text{I.2.3})$$

$$\tilde{\Gamma}\left(\frac{\omega}{\omega'_D}, g'\right) = Z_\Gamma^{-1} \tilde{\Gamma}\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right), \quad (\text{I.2.4})$$

$$g' = Z_g g. \quad (\text{I.2.5})$$

A Dyson-egyenlet az (I.2.3)—(I.2.5)-tel definiált transzformációkkal szemben invariáns kell legyen. Ez azt a követelményt tartalmazza, hogy G épp úgy transzformálódjék, mint $G_0\Gamma_0GGG\Gamma G$; ebből

$$Z_g = Z_d^{-2} Z_\Gamma \quad (\text{I.2.6})$$

következik. g' az ún. invariáns csatolás, mert skálatranszformációnál invariáns marad. Pontosabban a

$$g_R\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right) = g Z_\Gamma\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right) Z_d^{-2}\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right)$$

függvényre igaz, hogy

$$g_R\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right) = g_R\left(\frac{\omega}{\omega'_D}, g'\right).$$

A Z-k (I.2.3)—(I.2.5)-ből kaphatók $\omega = \omega'_D$ -t írva:

$$Z_d^{-1} = d^{-1}(1, g') d\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g\right), \quad (\text{I.2.7})$$

$$Z_\Gamma = \tilde{\Gamma}^{-1}(1, g') \tilde{\Gamma}\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g\right) \quad (\text{I.2.8})$$

és (I.2.6)-tal

$$g' = g d^{-2}(1, g') \tilde{\Gamma}^{-1}(1, g') d^2\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g\right) \tilde{\Gamma}\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g\right) \quad (\text{I.2.9})$$

(I.2.9) szelfkonzisztens megoldása szolgáltatja g' -t.

Az (I.2.3)—(I.2.5) egyenletek helyett azonos tartalmú differenciálegyenleteket szokás használni, az ún. Lie-egyenleteket. Ha $A\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right)$ olyan mennyiség, amelyre az

$$A\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g'\right) = ZA\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g\right) \quad (\text{I.2.10})$$

feltétel teljesül, akkor egyszerűen levezethető rá a

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln A(x, g) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} [\ln A(\xi, g'(x, g))]_{\xi} = 1 \quad (\text{I.2.11})$$

differenciálegyenlet. Itt $x \equiv \omega/\omega_D$.

Feltéve, hogy $g'(x, g)$ ismert és kicsi, az (I.2.11) egyenlet jobb oldalát (infinitézimális generátorát) perturbációs számítással meghatározhatjuk és ezután (I.2.11) megoldásával A nyerhető. Minthogy magát $g'(x, g)$ -t is (I.2.10)-típusú egyenlet határozza meg, (I.2.11) $g'(x, g)$ -re is vonatkozik. A

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln g'(x, g) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} [\ln g'(\xi, g'(x, g))]_{\xi} = 1 \quad (\text{I.2.12})$$

egyenlet megoldása az m.r.cs. technika alkalmazásának legelső lépése. A jobb oldalon a legalacsonyabb rendű diagramok járulékait behelyettesítve a differenciálegyenlet megoldása egy végtelen rendig felösszegzett perturbációs rész-sort eredményez. Az így nyert x -függő $g'(x, g)$ invariáns csatolást felhasználó, az infinitézimális generátorokra vonatkozó perturbációs eljárás akkor vezet jó eredményre, ha $g'(x, g)$ kicsi minden x értékre adott g mellett.

2.1. Elsőrendű renormálási csoport közelítés

Az előbb vázolt renormálási csoportegyenleteket általánosítanunk kell a BGD-modell tárgyalásához [13]. Nagyon lényeges, hogy akár a $g_1 = g_2$, vagy a $g_2 = 0$ speciális esetek vizsgálatánál is már a kiinduláskor két különböző nemzérus csatolási állandót vezessünk be és a specializálást csak a végeredményben hajtsuk végre. Az ok a következő. Bármelyik speciális esetben magasabb rendben azonnal megjelennek az általános

$$\Gamma_{\alpha\gamma\delta} = \Gamma_1 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - \Gamma_2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}$$

spinstruktúrájú járulékok $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ -vel, illetve $\Gamma_2 \neq 0$ -sal és ezért a két csatolás különbözőképpen renormálódik, illetve az eredetileg zérus járuléku csatornába is „becsurognak” járulékok. Ezért a leegyszerűsített renormálási csoport tárgyalásmód is általánosítandó: Γ_1 és Γ_2 külön-külön Z_{Γ_1} és Z_{Γ_2} -vel transzformálódik és megfelelően a g'_1 és g'_2 invariáns csatolások egyaránt fellépnek. Ez a tárgyalásmód csak úgy vihető keresztül, ha a kiinduláskor két, független, zérustól különböző g_1, g_2 -t tételezünk fel.

Mindezek alapján írjuk a

$$G(k_F, \omega) = d\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g_1, g_2\right) G_0(k_F, \omega)$$

Green-függvényben és a

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} = g_1 \tilde{\Gamma}_1(\omega) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - g_2 \tilde{\Gamma}_2(\omega) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}$$

vertex függvényben ω_D ω'_D -re való változtatásával egyidejűleg a $g_1, g_2 \rightarrow g'_1, g'_2$ változtatást. A multiplikatív módon való renormálhatóságot a

$$d\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g'_1, g'_2\right) = Z_d d\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g_1, g_2\right), \quad (I.2.13)$$

$$\tilde{\Gamma}_1\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g'_1, g'_2\right) = Z_{\Gamma_1}^{-1} \tilde{\Gamma}_1\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g_1, g_2\right),$$

$$\tilde{\Gamma}_2\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g'_1, g'_2\right) = Z_{\Gamma_2}^{-1} \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{\omega}{\omega_D}, g_1, g_2\right), \quad (I.2.14)$$

$$g'_1 = Z_d^{-2} Z_{\Gamma_1} g_1, \quad g'_2 = Z_d^{-2} Z_{\Gamma_2} g_2 \quad (I.2.15)$$

egyenletek fejezik ki. Segítségükkel g'_1, g'_2 -re $\tilde{\Gamma}_1, \tilde{\Gamma}_2$ -ra és d -re a ($i=1, 2$)

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln g'_i(x, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} [\ln g'_i(\xi, g'_1(x, g_1, g_2), g'_2(x, g_1, g_2))]_{\xi=1}, \quad (I.2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \tilde{\Gamma}_i(x, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} [\ln \tilde{\Gamma}_i(\xi, g'_1(x, g_1, g_2), g'_2(x, g_1, g_2))]_{\xi=1}, \quad (I.2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln d(x, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} [\ln d(\xi, g'_1(x, g_1, g_2), g'_2(x, g_1, g_2))]_{\xi=1} \quad (I.2.18)$$

Lie-egyenletek kaphatók.

Mindenekelőtt g'_i egyenletét kell megoldanunk. A jobb oldal perturbációs számítását a

$$g'_i = g_i d^{-2}(1, g'_1, g'_2) d^2\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g_1, g_2\right) \tilde{\Gamma}_i^{-1}(1, g'_1, g'_2) \tilde{\Gamma}_i\left(\frac{\omega'_D}{\omega_D}, g_1, g_2\right) \quad i=1, 2 \quad (I.2.19)$$

képlet alapján végezzük, mely (I.2.9) általánosítása a két csatolási állandó esetére. Az elsőrendű renormálási csoport közelítésben d -hez és $\tilde{\Gamma}_i$ -hoz g_1, g_2 -ben elsőrendű logaritmikus járulékokat számolunk. d -hez ilyen nincsen, $d(\omega)=1$, következésképp a vizsgált rendben

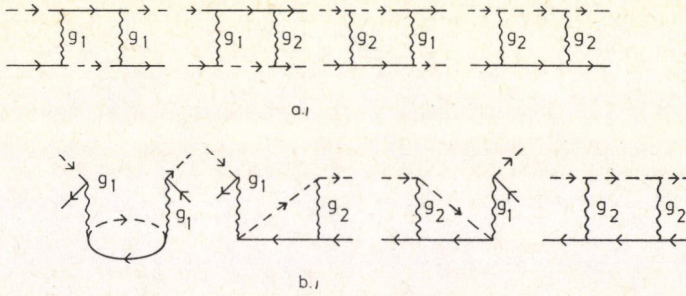
$$g'_i(x, g_1, g_2) = g_i \tilde{\Gamma}_i^{-1}(1, g'_1, g'_2) \tilde{\Gamma}_i(x, g_1, g_2). \quad (I.2.20)$$

A Cooper-típusú, $(\omega_1 + \omega_2)$ -ben logaritmikus vertexkorrekciókat az 5a), míg az $(\omega_3 - \omega_1)$ -ben logaritmikus Peierls-típusúakat az 5b) ábrán láthatjuk.

A megfelelő járulékok:

$$a) \quad \frac{1}{2\pi v} \left(\ln \frac{\omega}{\omega_D} - \frac{i\pi}{2} \right) [2g_1 g_2 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - (g_1^2 + g_2^2) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}],$$

$$b) \quad \frac{1}{2\pi v} \left(\ln \frac{\omega}{\omega_D} - \frac{i\pi}{2} \right) [(2g_1^2 - 2g_1 g_2) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + g_2^2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}].$$



5. ábra

Így $\tilde{\Gamma}_1$ és $\tilde{\Gamma}_2$ a vizsgált rendben:

$$\tilde{\Gamma}_1^{(1)} = 1 + \frac{g_1}{\pi v} \left(\ln \frac{\omega}{\omega_D} - \frac{i\pi}{2} \right) \quad (\text{I.2.21})$$

$$\tilde{\Gamma}_2^{(1)} = 1 + \frac{1}{2\pi v} \frac{g_1^2}{g_2} \left(\ln \frac{\omega}{\omega_D} - \frac{i\pi}{2} \right) \quad (\text{I.2.22})$$

és így g'_1 és g'_2 -re kapjuk, hogy

$$g_1^{(1)} = g_1 + \frac{g_1^2}{\pi v} \ln \frac{\omega_D'}{\omega_D}, \quad g_2^{(1)} = g_2 + \frac{g_1^2}{2\pi v} \ln \frac{\omega_D'}{\omega_D}. \quad (\text{I.2.23})$$

A g'_1, g'_2 mennyiségek valósnak adódtak, mert az (I.2.20) számlálójából és nevezőjéből az imaginárius részek kiejtik egymást. (I.2.23)-at (I.2.16) jobb oldalába helyettesítve a

$$\frac{\partial \ln g'_1(x, g_1, g_2)}{\partial x} = \frac{1}{\pi v x} g'_1(x, g_1, g_2), \quad (\text{I.2.24})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln g'_2(x, g_1, g_2) = \frac{1}{2\pi v x} g_1'^2(x, g_1, g_2) / g'_2(x, g_1, g_2) \quad (\text{I.2.25})$$

differenciálegyenletekhez jutunk. Ezek megoldása

$$g'_1(x) = g_1 \left[1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln x \right]^{-1}, \quad (\text{I.2.26})$$

$$g'_2(x) = \frac{1}{2} g'_1(x) + g_2 - \frac{1}{2} g_1. \quad (\text{I.2.27})$$

A vizsgált rendben és az imaginárius részekről eltekintve:

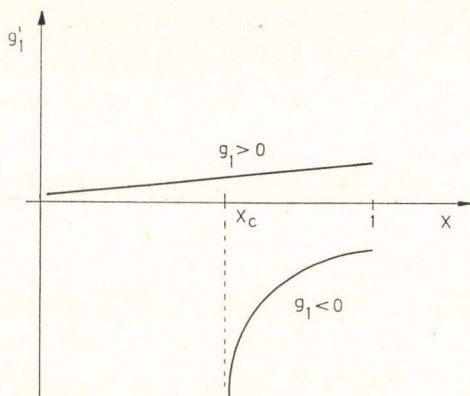
$$\Gamma_i(x) = g'_i(x), \quad i = 1, 2. \quad (\text{I.2.28})$$

A $g_1 \simeq g_2 \equiv g$ speciális esetben a BGD-modell eredeti, parkettaközelítésben számolt megoldása áll előttünk. $g_1 < 0$ esetén a megoldás az 1D Fermi-rendszer instabilitását mutatja $x = x_c$ -nél, ahol x_c az

$$1 = \frac{|g_1|}{\pi v} |\ln x_c| \quad (\text{I.2.29})$$

egyenlőséggel adott. g'_1, g'_2 -nek és rajtuk keresztül minden alapvető mennyiségnek itt szinguláris pontja van. Ez a nemfizikai szingularitás valójában a közelítés elégtelenségének jele a $g_1 < 0$ esetben, és ezért szükséges a magasabb rendű korrekciók figyelembevétele a Lie-egyenletek jobb oldalának meghatározásánál.

A taszító esetre, amikor is $g_1 > 0$, az elsőrendű közelítés kiváló eredményt ad, ha a $g_1/\pi v, |g_2/\pi v| \ll 1$ gyenge csatolási feltétel kielégül. $x \rightarrow 0$ esetén $g'_1(x) \rightarrow 0$ és $g'_2(x) \rightarrow g_2 - \frac{1}{2} g_1$. Az elsőrendű renormálási csoport közelítés eredményét g'_1 -re, a taszító, illetve vonzó esetekben a 6. ábrán rajzoltuk fel.



6. ábra

2.2. Másodrendű renormálási csoport közelítés

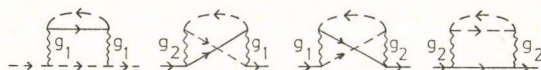
Ebben a pontban ismertetjük az invariáns csatolások másodrendű számítását [13]. Ehhez az invariáns csatolások (I.2.19) kifejezésében szereplő \tilde{F} és d mennyiségeket $g^2 \ln x$ rendig kell figyelembe venni. A vizsgált közelítésben már $d(x)$ sem állandó, hanem a 7. ábrán lerajzolt sajátenergiás gráfok

$$\Sigma^{(2)}(k_F, \omega) = \frac{1}{4\pi^2 v^2} (g_1^2 - g_1 g_2 + g_2^2) (\omega - \varepsilon(k)) \left(\ln x - \frac{i\pi}{2} \right) \quad (\text{I.2.30})$$

járolékán keresztül a

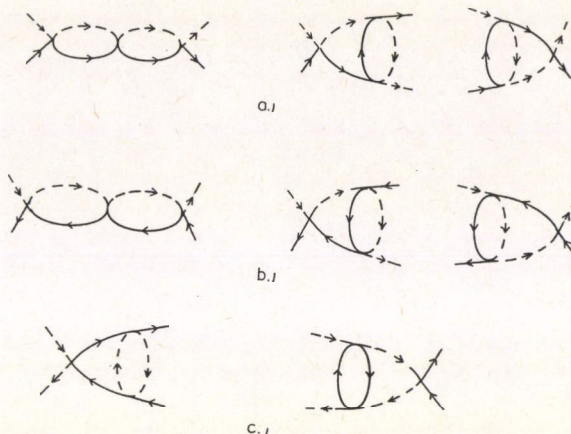
$$d^{(2)}(\omega) = 1 + \frac{1}{4\pi^2 v^2} (g_1^2 - g_1 g_2 + g_2^2) \left(\ln x - \frac{i\pi}{2} \right) \quad (\text{I.2.31})$$

perturbációs kifejezéssel rendelkezik. Az imaginárius részt is feltüntettük, bár az nem játszik szerepet a renormálásnál.



7. ábra

A harmadrendű vertexkorrekciókat (ami \tilde{F} -ban másodrendet jelent) csak sematikusan ábrázoljuk, nem különböztetve meg a $g_1^3, g_1^2, g_2, g_2^3, \dots$ stb.-vel arányos folyamatokat és a különböző spincsatornákat.



8. ábra

A 8.a) ábra mutatja a Cooper-csatorna tipikus diagramjait, a 8.b) ábra pedig a Peierls-típusú diagramokat ábrázolja. Ezekben 2-2 tipikusan logaritmikus elem fordul elő, és járulékaik így $\ln^2 x$ -szel arányosak. Más a helyzet a c) ábra gráfjainál. Ezek az I.1. pontban már említett, ott is c)-vel jelölt, legalacsonyabb rendben nem logaritmikus vertex-csatornába adnak járulékot, mégpedig $g^3 \ln x$ típusút. Az a) és b) gráfjárulékok azonban az elsőrendű számolás eredményében már bennfoglaltatnak; ezzel összhangban a Lie-egyenlet jobb oldalához nem járulnak hozzá, hiszen $\frac{\partial}{\partial \xi} \ln^2 \xi|_{\xi=1} = 0$. A 8.c.) gráfok viszont újak és alapvetően módosítják az elsőrendű számolás eredményét.

\tilde{F}_1, \tilde{F}_2 -re, a Lie-egyenlet jobb oldalához nem eltűnő járulékot adó (konstans és $\ln x$ -szel arányos) tagokat írva csak ki, a

$$\tilde{F}_1 = 1 + \frac{g_1}{\pi v} \left(\ln x - \frac{i\pi}{2} \right) + \frac{g_1 g_2 - g_2^2}{2\pi^2 v^2} \ln x - i\pi \frac{g_1^2}{\pi^2 v^2} \ln x + \dots, \quad (\text{I.2.32})$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_2 = & 1 + \frac{g_1^2}{g_2} \frac{1}{2\pi v} \left(\ln x - \frac{i\pi}{2} \right) + \frac{1}{4\pi^2 v^2} \frac{1}{g_2} \times \\ & \times (g_1^3 - 2g_1^2 g_2 + 2g_1 g_2^2 - 2g_2^3) \ln x - i\pi \frac{g_1^3}{g_2} \frac{1}{2\pi^2 v^2} \ln x + \dots \end{aligned} \quad (\text{I.2.33})$$

eredmény adódik. (I.2.31)–(I.2.33)-at (I.2.19)-be helyettesítve meggyőződhetünk

arról, hogy az imaginárius részek ismét kiejtik egymást és g'_1 , g'_2 -re a

$$g'_1 = g_1 + \frac{g_1^2}{\pi v} \ln x + \frac{g_1^3}{2\pi^2 v^2} \ln x, \quad (\text{I.2.34})$$

$$g'_2 = g_2 + \frac{g_1^2}{2\pi v} \ln x + \frac{g_1^3}{4\pi^2 v^2} \ln x \quad (\text{I.2.35})$$

eredmény jön ki. A Lie-egyenletek pedig (I.2.34) és (I.2.35) (I.2.16)-ba való helyettesítésével a

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln g'_1(x) = \frac{1}{x} \left(\frac{g'_1}{\pi v} + \frac{g_1'^2}{2\pi^2 v^2} \right). \quad (\text{I.2.36})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln g'_2(x) = \frac{1}{x} \frac{g'_1(x)}{g'_2(x)} \left(\frac{g'_1}{\pi v} + \frac{g_1'^2}{2\pi^2 v^2} \right) \quad (\text{I.2.37})$$

alakban állnak elő. A két egyenlet összehasonlításából adódik a

$$g'_2(x) = \frac{1}{2} g'_1(x) + g_2 - \frac{1}{2} g_1 \quad (\text{I.2.38})$$

összefüggés, melyet az elsőrendű számolás is, természetesen, kiadott. *Fowler* [43] megmutatta, hogy (I.2.38) a probléma megoldásában minden rendig érvényes.

(I.2.36) implicit megoldása egyszerűen adódik:

$$\ln x = -\frac{\pi v}{g'_1} + \frac{1}{2} \ln \frac{1 + g'_1/2\pi v}{g'_1/\pi v} + \frac{\pi v}{g_1} - \frac{1}{2} \ln \frac{1 + g_1/2\pi v}{g_1/\pi v}. \quad (\text{I.2.39})$$

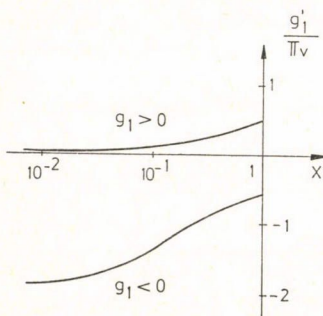
A $g'_1(x=1)=g_1$ ($g<0$)-ból folytonosan nyerhető megoldás olyan, hogy

$$\lim_{x \rightarrow 0} g'_1(x) = -2\pi v. \quad (\text{I.2.40})$$

Ezt ábrázolja a 9. ábra.

Az elsőrendű számítás (I.2.26) eredményével való összehasonlítás mutatja, hogy a vonzó, $g_1 < 0$, esetben a jelen pontban figyelembe vett másodrendű tagok hatása drasztikusan megváltoztatta az invariáns csatolások menetét. Eltűnt a véges x_c -nél fellépő nemfizikai singularitás, és ugyanez vonatkozik az invariáns csatolások ismeretében számolható egyéb mennyiségekre is.

Ezzel a BGD-modell eredeti, parkettaközelítéses számolásánál már felmerült probléma — úgy tűnik — megoldódott. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy az $x \rightarrow 0$ -nál kapott eredményt nem tekinthetjük pontosnak, hiszen itt a dimenziótlanított $|g'_1/2\pi v|$ mennyiség egységnyi nagyságúvá válik, és így a perturbációszámítás nem megbízható. Mindazonáltal, mind a magasabb rendű renormálási csoport számítások [44, 45], mind pedig egyéb módszerekkel nyert



9. ábra

eredmények [15, 16] azt mutatják, hogy a másodrendű renormálási csoport számítás, legalábbis kvalitatíve, helyes konklúziókra vezet. (Lásd I.2.4. alpontot.) A $g_1 > 0$ tasztító eset lényegesen egyszerűbb, a másodrendű számítás alig módosít az elsőrendű számolás eredményén, feltéve, hogy a csupasz csatolási állandók kicsik.

2.3. A multiplikatív renormálási csoport módszer alkalmazása a BGD-modellre a többváltozós esetben

Az előző pontokban azt az egyszerű esetet vizsgáltuk, amikor a vertex négy lábának impulzus- és energiaváltozói — egy kivételével — rögzítettek. Ezt a megszorítást oldjuk most fel, és három energiaváltozót tekintünk, az elsőrendű renormálási csoport közelítés keretében. A számítás nagyfokú bonyolultsága miatt magasabb rendben nem történt vizsgálat. A célkitűzés itt elsősorban az, hogy a renormálási csoport módszer általánosabb körülmények között való használhatóságát demonstráljuk, valamint a parkettaközelítés és az elsőrendű renormálási csoport közelítés kapcsolatára további fényt derítsünk [31].

A három független energiaváltozó helyett vezessük be x, y, z -t a következő definícióval:

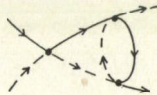
$$\omega_1 + \omega_2 \equiv x\omega_D, \quad \omega_1 - \omega_3 \equiv y\omega_D, \quad \omega_1 - \omega_4 \equiv z\omega_D$$

azaz

$$\omega_1 = \frac{1}{2}(x+y+z)\omega_D, \quad \omega_2 = \frac{1}{2}(x-y-z)\omega_D, \quad \omega_3 = \frac{1}{2}(x-y+z)\omega_D,$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2}(x+y-z)\omega_D.$$

Az impulzusok rögzítése továbbra is $k_1 = -k_F, k_2 = k_F, k_3 = k_F, k_4 = -k_F$ marad. Ilyen választás mellett az elsőrendű korrekció \tilde{F}_1, \tilde{F}_2 -hoz x - és y -ban logaritmikus, míg z -ben nem szinguláris. Következő rendben $\ln^2 x, \ln x \ln y, \ln^2 y, \ln y \ln z, \ln x \ln z$ és $\ln^2 z$ -vel arányos tagok adódnak; magasabb rendekben azután magasabb logaritmus hatványok is. Hogy melyek a vezető járulékok, az az energiaváltozók relatív értékétől függ. Példaként tekintsük a 10. ábra gráfját.



10. ábra

Ennek járuléka

$$\Gamma = \frac{I}{4\pi^2 v^2} \{ (2g_1^2 g_2 - 3g_1 g_2^2) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + (-2g_1^3 + 2g_1^2 g_2 + g_2^3) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \},$$

ahol

$$I = \begin{cases} \ln x \ln z - \frac{1}{2} \ln^2 z, & \text{ha } z > x, y \\ \ln x \ln y - \frac{1}{2} \ln^2 y, & \text{ha } y > x, z \\ \frac{1}{2} \ln^2 x & \text{egyébként.} \end{cases}$$

A logaritmikus közelítés lényege, melyet itt kihasználtunk, hogy

$$\ln(x+y) \simeq \begin{cases} \ln x, & \text{ha } x > y \\ \ln y, & \text{ha } y > x. \end{cases}$$

A háromváltozós esetben 6 különféle lehetőséget kell megkülönböztetnünk

- | | |
|-------------------|------------------------|
| 1) $z > x, y$ | 4) $y \sim z > x$ |
| 2) $x \sim z > y$ | 5) $y > x, z$ |
| 3) $x > y, z$ | 6) $x \sim y \geq z$. |

Ha z a legnagyobb változó, akkor a vertex mindhárom változó függvénye lesz, míg a 6) esetben az egyváltozós problémára egyszerűsödik a tárgyalás. A többi esetben a vertex x és y függvénye, de attól függően, hogy $x > y$ vagy $y > x$ és hogy z a nagyobbikkal, vagy a kisebbikkel egyező nagyságrendű, az explicit kifejezés más és más lesz. A továbbiakban két esetet fogunk megvizsgálni, 2)-t és 4)-et és az egyenleteket 2 változóra írjuk fel. A három változóra való általánosítás triviálisan elvégezhető.

\tilde{F}_1 és \tilde{F}_2 most két változótól függ. A Lie-egyenletek a következő alakban adódnak:

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \tilde{F}_i(x, y, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} \ln \tilde{F}_i\left(\xi, \frac{y}{x}, g'_1(x), g'_2(x)\right) \Big|_{\xi=1}, \quad (\text{I.2.41})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \ln \tilde{F}_i(x, y, g_1, g_2) = \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \tilde{F}_i\left(\frac{x}{y}, \eta, g'_1(y), g'_2(y)\right) \Big|_{\eta=1} \quad (\text{I.2.42})$$

$i = 1, 2.$

A Lie-egyenletek által meghatározott mennyiségek változói 0 és 1 közé eshetnek, így (I.2.41) $y \leq x$ és (I.2.42) pedig $x \leq y$ -ra alkalmazható csak. $x = y$ esetén a már ismert

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \tilde{F}_i(x, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} \ln \tilde{F}_i(\xi, g'_1(x), g'_2(x)) \Big|_{\xi=1}$$

egyenlet adódik mindkét fenti Lie-egyenletből. Itt

$$\tilde{F}_i(x, g_1, g_2) \equiv \tilde{F}_i(x, x, g_1, g_2).$$

A továbbiakban (I.2.41) és (I.2.42) jobb oldalát ismét perturbációs számítással határozzuk meg. Az egyváltozós esetben ennek érvényességét a $\xi=1$ pont közelében az invariáns csatolások kicsisége biztosította. Pontosabban megfogalmazva: minthogy a perturbációs sor $g'_i(x)$ hatványai szerint halad, a Lie-egyenletnek ezen perturbációs sor első néhány tagját felhasználó megoldása elég jó közelítés azon x -ek tartományában, melyekre $g'_i(x)$ még kicsi. Ha x változtatásával $g'_i(x)$ egységnyi nagyságrendűvé kezd válni, akkor a megoldás többé nem tekinthető megbízhatónak és legfeljebb kvalitatív információt szolgáltat a rendszerről. A kétváltozós esetben a helyzetet tovább bonyolítja az y/x -tól, illetve x/y -től való függés az (I.2.41), illetve (I.2.42) egyenletekben. Ha y/x nem esik az egység közelébe, akkor a közelítés kevésbé effektív. Így a közelítés érvényességére a kétváltozós esetben egy

további feltétel rovandó ki. Nem jelentkezik azonban ez a bonyodalom, ha a megoldás a két változóban faktorizálható, azaz

$$\tilde{F}(x, y, g_1, g_2) = \tilde{\gamma}_x(x, g_1, g_2) \tilde{\gamma}_y(y, g_1, g_2)$$

alakú. Az (I.2.41) és (I.2.42) egyenletek szerkezetéből világosan látszik, hogy ekkor a két egyenlet

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \tilde{\gamma}_x(x, g_1, g_2) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \xi} \ln \tilde{\gamma}_x(\xi, g'_1(x), g'_2(x)) \Big|_{\xi=1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \ln \tilde{\gamma}_y(y, g_1, g_2) = \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \tilde{\gamma}_y(\eta, g'_1(y), g'_2(y)) \Big|_{\eta=1}$$

alakra redukálódik, és a kellemetlen x/y , illetve y/x függések eltűnnek, a megoldások konvergencia-rádusza növekszik az általános esethez képest. Kérdés, hogy lehetséges-e az adott problémában faktorizálódó megoldást találni. Vizsgáljuk meg a 2), illetve a 4) esetekben \tilde{F}_1 és \tilde{F}_2 perturbációs sorát másodrendig. Nyilvánvaló ugyanis, hogy faktorizálódó megoldást csak akkor érdemes keresnünk, ha ezt a tulajdonságot maguk a perturbációs kifejezések is mutatják. A vertexek harmadrendig:

2) $x \sim z > y$

$$\Gamma_1 = g_1 \tilde{F}_1 = g_1 + \frac{g_1 g_2}{\pi v} \ln x + \frac{g_1}{\pi v} (g_1 - g_2) \ln y + \frac{1}{8\pi^2 v^2} \times [(3g_1^3 + 3g_1 g_2^2) \ln^2 x +$$

$$+ (7g_1^3 + 3g_1 g_2^2 - 8g_1^2 g_2) \ln^2 y + (-2g_1^3 + 8g_1^2 g_2 - 6g_1 g_2^2) \ln x \ln y] + \dots$$

$$\Gamma_2 \equiv g_2 \tilde{F}_2 = g_2 + \frac{g_1^2 + g_2^2}{2\pi v} \ln x - \frac{g_2^2}{2\pi v} \ln y + \frac{1}{8\pi^2 v^2} \times$$

$$\times [(4g_1^3 + 3g_1^2 g_2 + g_2^3) \ln^2 x + (g_2^3 - g_1^2 g_2) \ln^2 y + (-2g_2^3 - 2g_1^2 g_2) \ln x \ln y] + \dots$$

4) $y \sim z > x$

$$\Gamma_1 = g_1 + \frac{g_1 g_2}{\pi v} \ln x + g_1 \frac{g_1 - g_2}{\pi v} \ln y + \frac{1}{8\pi^2 v^2} \times$$

$$\times [(2g_1^3 + 2g_1^2 g_2 + 3g_1 g_2^2) \ln^2 x + (6g_1^3 + 3g_1 g_2^2 - 6g_1^2 g_2) \times$$

$$\times \ln^2 y + (4g_1^2 g_2 - 6g_1 g_2^2) \ln x \ln y] + \dots$$

$$\Gamma_2 = g_2 + \frac{g_1^2 + g_2^2}{2\pi v} \ln x - \frac{g_2^2}{2\pi v} \ln y + \frac{1}{8\pi^2 v^2} \times$$

$$\times [(2g_1^3 + g_2^3 + 4g_1^2 g_2) \ln^2 x + (-2g_1^3 + g_2^3) \ln^2 y + (4g_1^3 - 4g_1^2 g_2 - 2g_2^3) \ln x \ln y] + \dots$$

Könnyen látható, hogy ezen kifejezésekből csak a 2) eset Γ_2 -je faktorizálható; a többi nem. Ha viszont Γ_1, Γ_2 helyett a

$$\Gamma_3 = 2\Gamma_1 - \Gamma_2, \quad \Gamma_2$$

ha $x \sim z > y$, és a

$$\Gamma_+ = -(\Gamma_1 + \Gamma_2), \quad \Gamma_- = \Gamma_1 - \Gamma_2,$$

ha $y \sim z > x$ kombinációkat használhatjuk, akkor már megfelelő, faktorizálódó mennyiségek vannak.

Valóban, a renormálhatóság érvényes a lineáris kombinációkra is, ha az összetevőkre érvényes volt. Pontosabban igaz a következő: ha $\tilde{\Gamma}_1$, illetve $\tilde{\Gamma}_2$ a Z_1 , illetve Z_2 faktorokkal multiplikatív módon renormálhatók, akkor a

$$\tilde{\Gamma} = \frac{\alpha\Gamma_1 + \beta\Gamma_2}{\alpha g_1 + \beta g_2}$$

lineáris kombináció is hasonló tulajdonságú a

$$Z = \frac{\alpha Z_1 g_1 + \beta Z_2 g_2}{\alpha g_1 + \beta g_2}$$

renormálási faktorial, és így a Lie-egyenlet is használható minden ilyen lineáris kombinációra.

Ezután Γ_3, Γ_2 és Γ_+, Γ_- -t ilyen alakban keressük

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_3 &= \tilde{\gamma}_{3x}(x) \tilde{\gamma}_{3y}(y) & \tilde{\Gamma}_2 &= \tilde{\gamma}_{2x}(x) \tilde{\gamma}_{2y}(y) & x > y \\ \tilde{\Gamma}_+ &= \tilde{\gamma}_{+x}(x) \tilde{\gamma}_{+y}(y) & \tilde{\Gamma}_- &= \tilde{\gamma}_{-x}(x) \tilde{\gamma}_{-y}(y) & y > x \end{aligned}$$

és így pl. $\tilde{\gamma}_{3y}(y)$ -ra a Lie-egyenlet (I.2.26) és (I.2.27) felhasználásával:

$$\frac{\partial}{\partial y} \ln \tilde{\gamma}_{3y}(y) = \frac{1}{2\pi v y} [2g'_1(y) - g'_2(y)] = \frac{1}{2\pi v y} \left[\frac{3}{2} \frac{g_1}{1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln y} - g_2 + \frac{1}{2} g_1 \right],$$

melynek megoldása:

$$\tilde{\gamma}_{3y}(y) = \left(1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln y \right)^{-3/4} \exp \left[-\frac{g_2 - \frac{1}{2} g_1}{2\pi v} \ln y \right].$$

Hasonlóképpen eljárva a többi $\tilde{\gamma}$ -val, végülis megkapjuk a $\Gamma_3, \Gamma_2, \Gamma_+, \Gamma_-$ vertex függvényeket. Ezek közül itt leírjuk a Γ_3 és Γ_2 kifejezéseit:

$$\begin{aligned} \Gamma_3(x, y) &= \left(\frac{3}{2} \frac{g_1}{1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln x} - g_2 + \frac{1}{2} g_1 \right) \left(1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln x \right)^{3/4} \left(1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln y \right)^{-3/4} \times \\ &\quad \times \exp \left[\frac{g_2 - \frac{1}{2} g_1}{2\pi v} (\ln x - \ln y) \right], \\ \Gamma_2(x, y) &= g_2 \left(1 - \frac{g_1}{g_2} \frac{g_2 - \frac{1}{2} g_1}{\pi v} \ln x \right) \left(1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln y \right)^{1/4} \left(1 - \frac{g_1}{\pi v} \ln x \right)^{-5/4} \times \\ &\quad \times \exp \left[(2\pi v)^{-1} \left(g_2 - \frac{1}{2} g_1 \right) (\ln x - \ln y) \right]. \end{aligned}$$

Ezen megoldások pontosan megegyeznek *Bücskov*, *Gorkov* és *Dzsalosinszkij* [9] eredményével, melyet ők nemlineáris integrál egyenletek parkettaközelítésben való megoldásából nyertek. Nem következik ebből, hogy a parkettaközelítés általánosságban ekvivalens lenne az elsőrendű renormálási csoport közelítéssel: a parkettaközelítés nemlineáris integrálegyenletei nem transzformálhatók általában a bemutatott formájú egyszerű differenciálegyenletekké. A faktorizálható eset azonban olyan, hogy a parkettaegyenletek valóban átírhatók ekvivalens tartalmú differenciálegyenletekké. Nagyon valószínűtlennek tűnik, hogy a kétfajta közelítési séma általánosságban ugyanazon gráf-osztály felösszegezésének felelne meg.

3. A BGD-modell rezponzfüggvényeire vonatkozó ismeretek összefoglalása

A későbbiek szempontjából szükségünk lesz az 1D vezető rendszer rezponzfüggvényeire, főként a sűrűség hullám (CDW) típusúra. A jelen pont szolgál az idevágó irodalom vázlatos ismertetésére.

Először *Dzsalosinszkij* és *Larkin* [10] mutatták meg, parkettaközelítést használva, hogy a BGD-modell keretén belül az elektrongázban különféle állapotok alakulhatnak ki: normál (N), szupravezető (SC), sűrűség hullám (CDW) és spinsűrűség hullám (SDW) állapot, a csatolási állandók nagyságától és előjelétől függően. Minthogy a számolás parkettaközelítést alkalmazott, az eredményei csak a $T > T_{1D}$ magashőmérsékleti fázisban kialakulni kezdő 1D fluktuációk jellegét mutatják, hiszen 1D instabilitás csak zérus hőmérsékleten állhat be. Itt T_{1D} karakterisztikus hőmérséklet, amelyen az említett instabilitásokat előrejelző fluktuációk felerősödése megindul. A másodrendű renormálási csoport közelítés

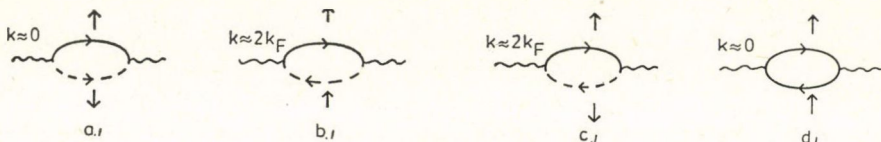
$$T_{1D} \simeq \omega_{1D} \left(\frac{|g_1|}{2\pi v} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\pi v}{|g_1|} \right)$$

értéket szolgáltat ($g_1 < 0$ esetre) hasonlóan az 1D Hubbard-modell egzakt megoldásához (lásd *Gorkov* [46]).

A különféle rezponzoknak a $T < T_{1D}$ tartományban való vizsgálata két úton történt. Renormálási csoport módszerrel, a másodrendű közelítésben, *Sólyom* [14] számolta a rezponzfüggvényeket zérus hőmérsékleten és a g_1, g_2 síkon feltérképezte a lehetséges instabilitásokat. Később eggyel magasabb rendig elmenve *Ting* [44] és legújabban *Rezayi et al.* [45] jutottak a másodrendű számolástól csak kevésbé különböző eredményre.

A másik vonalat az egzakt megoldásokból levonható, illetve extrapolálható eredmények jelentik. A $g_1 > 0$ eset az egzaktul megoldható *Tomonaga*-modellel [47, 32] hozható közvetlen kapcsolatba; ez a része a problémának azonban amúgy sem okozott nehézséget, hiszen a parkettaközelítés, illetve elsőrendű renormálási csoport számítás már kielégítően leírja a rendszert. Sokkal lényegesebb a $g_1 < 0$ esetre vonatkozó, azonban csak a csatolási állandó egy speciális eseténél fellelhető ($g_1/\pi v = -6/5$, g_2 tetszőleges) egzakt megoldás, mely *Luther* és *Emery* [15] nevéhez fűződik. g_1 egyéb értékeire a *Luther—Emery* eredmények kiterjesztését *Lee* végezte el [16]. Mindezek alapján szűrődtek le az 1D rezponzfüggvények $T < T_{1D}$ -nél érvényes alakjára vonatkozó ismeretek, amelyeket most vázolunk.

Mindenekelőtt rá kell mutatnunk, hogy a szinguláris viselkedést már az elemi buborékok sugallják. A 11.a) ábrán látható Cooper-buborék, a 11.b) ábra mutatta Peierls ($2k_F$ -es sűrűség) buborék és a két vonalon ellenkező spinállással a 11.c) ábra buborékja $\ln x$ -szel arányosnak bizonyulnak, míg pl. a 11.d) ábra $k \approx 0$ -ás sűrűségbuborékja nem viselkedik szingulárisan, ha $x \rightarrow 0$. A kölcsönhatás azután a buborékok egész sorának és egyéb gráfoknak a felösszegezését teszi szükségessé és a számítások azt mutatják, hogy a logaritmus hatványok hatványfüggvényekké összegeződnek.



11. ábra

Definiáljuk a három rezponzfüggvényt:

$$\chi_{1D}^{SC}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times$$

$$\times \left\langle T_\tau \left[\int \frac{dp}{2\pi} a_{p+k\uparrow}^+(\tau) a_{-p\downarrow}^+(\tau) \int \frac{dp'}{2\pi} a_{-p'\downarrow}(0) a_{p'+k\uparrow}(0) \right] \right\rangle \quad k \approx 0, \quad (I.3.1)$$

$$\chi_{1D}^{CDW}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times$$

$$\times \left\langle T_\tau \left[\sum_{\alpha\beta} \int \frac{dp}{2\pi} a_{p\alpha}^+(\tau) a_{p+k\alpha}(\tau) \int \frac{dp'}{2\pi} a_{p'\beta}^+(0) a_{p'-k\beta}(0) \right] \right\rangle \quad k \approx 2k_F, \quad (I.3.2)$$

$$\chi_{1D}^{SDW}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times$$

$$\times \left\langle T_\tau \left[\int \frac{dp}{2\pi} a_{p\uparrow}^+(\tau) a_{p+k\downarrow}(\tau) \int \frac{dp'}{2\pi} a_{p'\downarrow}^+(0) a_{p'-k\uparrow}(0) \right] \right\rangle \quad k \approx 2k_F. \quad (I.3.3)$$

Itt $\omega_v = 2\pi\nu T$ és a felső ω -félsíkra való analitikus folytatás után adódik a hőmérsékletfüggő $\chi_{1D}^{SC}(k, \omega)$, $\chi_{1D}^{CDW}(k, \omega)$ és $\chi_{1D}^{SDW}(k, \omega)$. $k=0$, $\omega=0$ és $T < T_{1D}$ -re a rezponzfüggvények a

$$\chi_{1D}^i = \Gamma_i \left(\frac{T}{T_{1D}} \right)^{-\gamma_i} \quad i = SC, \quad CDW, \quad SDW \quad (I.3.4)$$

alakúak. A γ_i kitevőre vonatkozó eredményeket az I. táblázatba sűrítettük.

I. táblázat. A γ_i ($i=CDW, SC, SDW$) kitevőkre vonatkozó ismereteink összegezése. A „Tomonaga” és „Luther—Emery” felíratú oszlopokban a zárójelben

I. TÁBLÁZAT

	Renorm. csop. $g_1 > 0$	Renorm. csoport $g_1 < 0$	Tomonaga $g_1 > 0$	Luther—Emery $g_1 < 0$
$-\gamma_{CDW}$	$\frac{1}{2\pi v} (g_1 - 2g_2)$	$-3/2$	$-\gamma_e - 1 \left(\simeq \frac{g_1 - 2g_2}{2\pi v} \right)$	$-\gamma_e - 2 \left(\simeq -1 + \frac{g_1 - 2g_2}{2\pi v} \right)$
$-\gamma_{SC}$	$\frac{-1}{2\pi v} (g_1 - 2g_2)$	$-3/2$	$-\gamma_e^{-1} - 1 \left(\simeq \frac{-g_1 + 2g_2}{2\pi v} \right)$	$-\gamma_e^{-1} - 2 \left(\simeq -1 - \frac{g_1 - 2g_2}{2\pi v} \right)$
$-\gamma_{SDW}$	$\frac{1}{2\pi v} (g_1 - 2g_2)$	χ nem szinguláris	$-\gamma_e - 1 \left(\simeq \frac{g_1 - 2g_2}{2\pi v} \right)$	χ nem szinguláris

a $\frac{|g_1|}{2\pi v}, \frac{|g_2|}{2\pi v} \ll 1$ gyenge csatolási esetnek megfelelő értéknek találhatók, amelyek a

$$-\gamma_e = \left(\frac{1 + \frac{1}{2\pi v} (g_1 - 2g_2)}{1 - \frac{1}{2\pi v} (g_1 - 2g_2)} \right)^{1/2} \quad (\text{I.3.5})$$

kifejezés sorfejtésével nyerhetők.

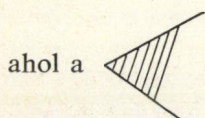
A későbbiek szempontjából minket érdeklő γ_{CDW} milyen értékek között változhat? A $g_1 > 0$ esetben, speciális g_1, g_2 esetén lehet 1 (pl. $g_1 = g_2 \equiv g > 0$ esetén, ha $g/2\pi v = 1$), illetve a $g_1 < 0$ esetben speciális g_1, g_2 mellett lehet 2 (pl. $g_2 = 0, g_1 = -2\pi v$). Ezek a határesetek erős csatolásnál állnak elő. Gyenge csatolásnál $\gamma \simeq g$ kicsi, ha taszító eset van és $\gamma \simeq 1$ a vonzó esetben. Mi majd a későbbiekben $\gamma \simeq 1$ -gyel fogunk dolgozni, ami tehát erős taszító, vagy gyenge vonzó láncban belüli kölcsönhatást jelent. Az előbbi megvalósulhat, ha erős Coulomb-kölcsönhatás érvényesül, az utóbbit gyenge fonon-közvetítette elektron-elektron kölcsönhatás testesítheti meg. TTF—TCNQ esetében mindkét verzióra szerepelnek érvek az irodalomban.

Az (I.3.4)-ben szereplő Γ_i együtthatókra nem ismeretes megbízható irodalmi adat.

A csatolt probléma tárgyalásánál szükségünk lesz egy rezszponz-segédmenyi-ségre, mely egyrészt a parkettaközelítésből, másrészt a renormálási csoport módszerből ered természetes módon. A CDW-rezszponzfüggvényt Dzsalosinszkij és Larkin [10] a 12. ábrán látható diagram alapján számolja.



12. ábra



ahol a vertex $n(2k_F, \xi)$ járulékára integrálegyenletet írnak fel. Lényeges

itt, hogy minden rész logaritmikus integrálást ad, és így a 12. ábrából



kaphatóan (ξ logaritmikus változó)

$$\chi_{1D}^{CDW} = \frac{1}{\pi v} \int_{\ln\left(\frac{\pi T}{\omega_D}\right)} d\xi n^2(2k_F, \xi) \quad (I.3.6)$$

Másrésről a renormálási csoport módszerben Lie-egyenlet χ_{1D}^{CDW} -re (és a többi χ_{1D}^i -re) nem írható fel; a

$$\bar{\chi}_{1D}^{CDW} \equiv \pi v \frac{\partial \chi_{1D}}{\partial \xi} \quad (I.3.7)$$

definícióval adott $\bar{\chi}_{1D}^{CDW}$ -ra azonban már igen és valóban, χ_{1D} -t $\bar{\chi}_{1D}$ segítségével szokás meghatározni. (I.3.6) és (I.3.7) összehasonlítása mutatja, hogy

$$\bar{\chi}_{1D}^{CDW}(2k_F, \xi) = n^2(2k_F, \xi). \quad (I.3.8)$$

Szükségünk lesz a későbbiekben $\bar{\chi}_{1D}^{CDW}$ renormálási csoport egyenletére, ezért itt idézzük Súlyom [14] másodrendű közelítésben felírt egyenletét:

$$\frac{\partial \ln \bar{\chi}_{1D}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} \left[2(2g'_1 - g'_2) + \frac{2}{2\pi v} (g_1'^2 + g_2'^2 - g'_1 g'_2) \right]. \quad (I.3.9)$$

4. Egzakt megoldás az $n \rightarrow \infty$ határesetben

Az I.1. pontban ismertettük az 1D BGD-féle Fermi-gáz modellt; közelítő megoldását a renormálási csoport módszer segítségével az I.2. pont tartalmazza. Utaltunk a modell Luther és Emery-től származó egzakt megoldására is (I.3. pont), mely a g_1 előreszórási csatolási állandó egy speciális választása mellett érvényes.

Ebben a pontban nem az eredeti modellt fogjuk tárgyalni, hanem annak egy általánosított változatát [20]. Az általánosítás abban áll, hogy a keltő és eltüntető operátorokhoz egy további, i -vel jelölt komponens indexet rendelünk; a komponensek összes száma legyen n .

Az $n \rightarrow \infty$ határesetben a modell fázisátalakulást ad olyan értelemben, hogy hosszú távú rend (ODLRO) áll be véges hőmérsékleten vonzó, rövid hatótávolságú kölcsönhatásokra is. A fázisátalakulás egzaktul átlagtér (MF) típusú, és természete attól függ, hogy a kölcsönhatási potenciált mily módon általánosítjuk.

Egy ilyen, az első pillantásra meglehetősen mesterkéltnek tűnő modell tárgyalása két szempontból is érdekes. 1. Adhatunk az i indexnek olyan interpretációt, hogy az különböző láncokat jelöl egy kvázi 1D rendszerben. Így valójában 3D rendszerhez jutunk és a fázisátalakulás ténye nem meglepő. Ugyanakkor a kölcsönhatás i -függésének különféle választásai jól megvilágítják azt, hogy milyen esetekben várható SC, CDW, vagy SDW fázisátalakulás és így ez a modell jó átvezetést jelent a csatolt láncok 3D problémájához [23]. 2. Elvileg érdekes annak vizsgálata, hogy 1D-ban a többlet szabadsági fokok bevezetése milyen mechanizmus révén vezet fázisátmenethez véges hőmérsékleten az említett határesetben.

Az n -komponensű rendszer Hamilton-operátora:

$$H^{(n)} = H_0^{(n)} + H_{\text{int}}^{(n)} \quad (\text{I.4.1})$$

$$H_0^{(n)} = \sum_{k\alpha i} \varepsilon_k a_{k\alpha i}^+ a_{k\alpha i}$$

$$H_{\text{int}}^{(n)} = L^{-1} \sum_{ijkl} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} [g_{1ijkl}(k_1, \dots, k_4) a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+$$



$$a_{k_3\beta k} a_{k_4-2k_F\alpha l} + g_{2ijkl}(k_1, \dots, k_4) a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3-2k_F\beta k} a_{k_4\alpha l}],$$

ahol $a_{k\alpha i}^+$ k impulzusú, α spinkomponensű és i komponensindexű elektront kelt.

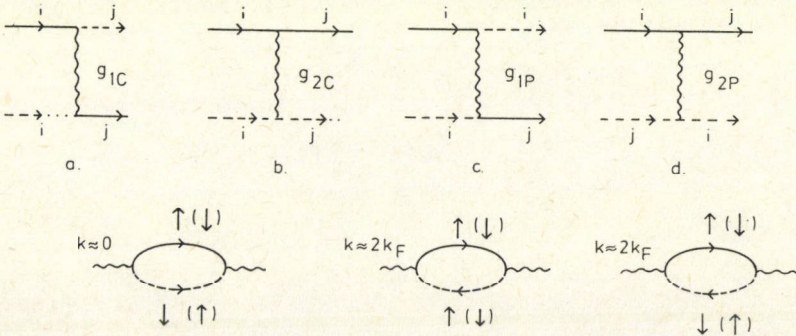
Az összes $k_1, \dots, k_4 + k_F$ közelébe esik. L a rendszer lineáris kiterjedése, $\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$. A felcserélési szabályok:

$$\{a_{k\alpha i}^+ a_{k'\beta j}\} = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}, \quad \{a_{k\delta i} a_{k'\beta j}\} = 0.$$

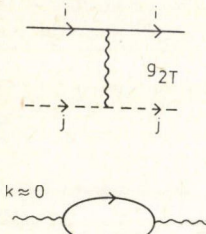
A $g_{1ijkl}(k_1, \dots, k_4)$, $g_{2ijkl}(k_1, \dots, k_4)$ kölcsönhatási potenciálokat úgy egyszerűsítjük, hogy az i, j, k, l indexeket illetően két Kronecker-deltát tartalmazzanak és az impulzusfüggést illetően levágással ellátott konstansok legyenek akár csak az eredeti BGD-modellben, valamint $1/n$ -nel arányosnak tételezzük fel őket. Ez utóbbi feltevés igen lényeges és azt biztosítja, hogy $H^{(n)}$ mindkét tagja n rendű.

A modellt az $n \rightarrow \infty$ határesetben kívánjuk vizsgálni. A legfontosabb tulajdonság ekkor a döntő járulékok kiválasztása szempontjából az, hogy a  és  buborékok \sum_i fellépése miatt n -es faktort kapnak. A probléma 1D logaritmikus jellege természetesen változatlan, így ismét csak a Cooper- és Peierls-buborékok érdekelnek minket szinguláris tulajdonságaik miatt. Ezen buborékokat a 13. ábrán látható elemi kölcsönhatások tudják úgy csatolni, hogy a már említett $\sum_i = n$ -es faktorok az $\ln x$ -eket felerősítsék.

A 13. ábra a) és b) elemi vertexei Cooper-kölcsönhatások, amennyiben a nagy n határesetben ezek a szupravezető válasz felerősödéséhez vezetnek; erre utal az ábra alsó részén látható Cooper-buborék. c) és d) Peierls-típusú kölcsönhatások, azaz a $2k_F$ -es részecskelyuk buborékokat n -faktorokhoz segítik, mégpedig g_{1P} zérus eredő spinnel (CDW), g_{2P} pedig tetszőleges spinállással (CDW + SDW).



13. ábra



14. ábra

Érdemes megjegyezni, hogy g_{2P} az i, j indexekben kicserélődési jellegű kölcsönhatás; ez vezethet antiferromágneses (SDW) rend kialakulásához, ha i, j -t lánc indexként interpretáljuk. Ugyanekkor g_{1C}, g_{2C} Cooper-pár hoppingot létesít, míg g_{1P} különböző i -jú sűrűséghullámok között létesít csatolást. Egy, a 14. ábrán bemutatott kölcsönhatástípus, melyet direkt előreszórási, vagy Tomonaga-típusú kölcsönhatásnak is nevezhetünk, csak az alatta ábrázolt buboréknak kedvez, a már említett értelemben, azaz a $k \approx 0$ -ás sűrűséghullámokat csatolja szívesen, és így ez irrelevánsnak fog bizonyulni. Szerepére később még visszatérünk.

Hajtsunk végre most a 13. ábra kölcsönhatásaival renormálási csoport számítást. A kölcsönhatások struktúrája alapján négy elemi vertex vezetendő be:

$$\Gamma_{1C\alpha\beta\gamma\delta}^{ijkl} = \Gamma_{1C} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{ij} \delta_{kl},$$

$$\Gamma_{2C\alpha\beta\gamma\delta}^{ijkl} = \Gamma_{2C} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{ij} \delta_{kl},$$

$$\Gamma_{1P\alpha\beta\gamma\delta}^{ijkl} = \Gamma_{1P} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{ik} \delta_{jl},$$

$$\Gamma_{2P\alpha\beta\gamma\delta}^{ijkl} = \Gamma_{2P} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{ik} \delta_{jl}.$$

A csupasz csatolások $g_{1C}, g_{2C}, g_{1P}, g_{2P}$ mind $1/n$ rendűnek lesznek feltételezve; jelölésük $g_{1C} = \bar{g}_{1C}/n$ stb. és $\bar{g}_{1C} = O(1)$.

Végezzünk perturbációs számítást a Lie-egyenletek jobb oldalának kiszámítására. A Hamilton-operátorunk (I.4.1), ahol az említett egyszerűsítések elvégzése után

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}^{(n)} = & \frac{1}{L} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} [g_{1C} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta i}^+ a_{k_3\beta j} a_{k_4-2k_F\alpha j} + \\ & + g_{2C} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta i}^+ a_{k_3-2k_F\beta j} a_{k_4\alpha j} + g_{1P} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j} \times \\ & \times a_{k_3\beta j} a_{k_4-2k_F\alpha i} + g_{2P} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3-2k_F\beta i} a_{k_4\alpha j}]. \end{aligned} \quad (\text{I.4.2})$$

Az invariáns csatolások perturbációs kifejezései másodrendig és $1/n$ -ben vezető rendig

$$\bar{g}'_{1C} = \bar{g}_{1C} + \frac{1}{\pi v} \bar{g}_{1C} \bar{g}_{2C} \ln x + O(1/n),$$

$$\bar{g}'_{2C} = \bar{g}_{2C} + \frac{1}{2\pi v} (\bar{g}_{1C}^2 + \bar{g}_{2C}^2) \ln x + O(1/n),$$

$$\bar{g}'_{1P} = \bar{g}_{1P} + \frac{1}{\pi v} (\bar{g}_{1P}^2 - \bar{g}_{1P} \bar{g}_{2P}) \ln x + O(1/n),$$

$$\bar{g}'_{2P} = \bar{g}_{2P} - \frac{1}{2\pi v} \bar{g}_{2P}^2 \ln x + O(1/n).$$

A ki nem írt tagok elhanyagolhatók, feltéve, hogy $\frac{1}{n} \ll \bar{g} \ln x \lesssim 1$. Felhasználásukkal a következő Lie-egyenletek vezethetők le

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \bar{g}'_{1C} = \frac{1}{\pi v x} \bar{g}'_{2C}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \ln \bar{g}'_{2C} = \frac{1}{2\pi v x} \left(\frac{\bar{g}'_{1C}}{\bar{g}'_{2C}} + \bar{g}'_{2C} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \bar{g}'_{1P} = \frac{1}{\pi v x} (\bar{g}'_{1P} - \bar{g}'_{2P}), \quad \frac{\partial}{\partial x} \ln \bar{g}'_{2P} = -\frac{1}{2\pi v x} \bar{g}'_{2P}.$$

Megoldásaik rendre

$$\bar{g}'_{1C} + \bar{g}'_{2C} = (\bar{g}_{1C} + \bar{g}_{2C}) \left[1 - \frac{\bar{g}_{1C} + \bar{g}_{2C}}{2\pi v} \ln x \right]^{-1}, \quad (\text{I.4.3})$$

$$\bar{g}'_{2C} - \bar{g}'_{1C} = (\bar{g}_{2C} - \bar{g}_{1C}) \left[1 - \frac{\bar{g}_{2C} - \bar{g}_{1C}}{2\pi v} \ln x \right]^{-1}, \quad (\text{I.4.4})$$

$$2\bar{g}'_{1P} - \bar{g}'_{2P} = (2\bar{g}_{1P} - \bar{g}_{2P}) \left[1 - \frac{2\bar{g}_{1P} - \bar{g}_{2P}}{2\pi v} \ln x \right]^{-1}, \quad (\text{I.4.5})$$

$$\bar{g}'_{2P} = \bar{g}_{2P} \left[1 + \frac{\bar{g}_{2P}}{2\pi v} \ln x \right]^{-1}. \quad (\text{I.4.6})$$

Az $n \rightarrow \infty$ határesetben ezek egzakt megoldások, minden további járulék elhanyagolható. Összesen négy x_c értéknél léphet fel pólus, melyek az alábbi válaszfüggvényekben jelentkeznek szingularitásként:

1. Szinglett szupravezető

$$\chi^{\text{SSC}}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times \\ \times \left\langle T_\tau \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_i \int \frac{dp}{2\pi} a_{p+ki}(\tau) a_{-pi}(\tau) \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_j \int \frac{dp'}{2\pi} a_{-p'+lj}^+(0) a_{p'+ktj}^+(0) \right] \right\rangle \quad k \simeq 0 \quad (\text{I.4.7})$$

2. triplétt szupravezető ($i=1$ esetén ezt a válaszfüggvényt *Fukuyama et al.* [48] vizsgálta először az 1D modell keretében)

$$\chi^{\text{TSC}}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times \\ \times \left\langle T_\tau \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_i \int \frac{dp}{2\pi} \frac{p}{|p|} a_{p+ki}(\tau) a_{-pi}(\tau) \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_j \int \frac{dp'}{2\pi} \frac{p'}{|p'|} a_{-p'+lj}^+(0) a_{p'+ktj}^+(0) \right] \right\rangle \quad (\text{I.4.8})$$

3. Sűrűséghullám

$$\chi^{\text{CDW}}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times \\ \times \left\langle T_\tau \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i\alpha} \int \frac{dp}{2\pi} a_{p\alpha i}^+(\tau) a_{p+ki}(\tau) \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j\beta} \int \frac{dp'}{2\pi} a_{p'\beta j}^+(0) a_{p'-k\beta j}(0) \right] \right\rangle \quad k \simeq 2k_F \quad (\text{I.4.9})$$

4. Spinsűrűséghullám

$$\chi^{\text{SDW}}(k, \omega_v) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_v \tau} \times \\ \times \left\langle T_\tau \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_i \int \frac{dp}{2\pi} a_{pi}^+(\tau) a_{p+ki}(\tau) \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_j \int \frac{dp'}{2\pi} a_{p'j}^+(0) a_{p'-kj}(0) \right] \right\rangle \quad k \simeq 2k_F \quad (\text{I.5.10})$$

Ezen kifejezések analitikus folytatása a felső ω fél síkra adja a tényleges válaszfüggvényeket, melyek $\omega=0$ esetén az $n \rightarrow \infty$ határesetben a

$$\chi^{\text{SSC}} \sim (T - T_{c1})^{-1}, \quad T_{c1} = \omega_D \exp(-2\pi v / |\bar{g}_{1C} + \bar{g}_{2C}|), \quad \bar{g}_{1C} + \bar{g}_{2C} < 0, \quad (\text{I.4.11})$$

$$\chi^{\text{TSC}} \sim (T - T_{c2})^{-1}, \quad T_{c2} = \omega_D \exp(-2\pi v / |\bar{g}_{1C} - \bar{g}_{2C}|), \quad \bar{g}_{2C} - \bar{g}_{1C} < 0, \quad (\text{I.4.12})$$

$$\chi^{\text{CDW}} \sim (T - T_{c3})^{-1}, \quad T_{c3} = \omega_D \exp(-2\pi v / |2\bar{g}_{1P} - \bar{g}_{2P}|), \quad 2\bar{g}_{1P} - \bar{g}_{2P} < 0, \quad (\text{I.4.13})$$

$$\chi^{\text{SDW}} \sim (T - T_{c4})^{-1}, \quad T_{c4} = \omega_D \exp(-2\pi v / \bar{g}_{2P}), \quad \bar{g}_{2P} > 0 \quad (\text{I.4.14})$$

alakúak. A válaszfüggvények egzaktul átlagtér-típusú exponenst mutatnak.

Megjegyzésre érdemes, hogy ha csak két csatolási állandónk lenne pl. $\bar{g}_{1C} = \bar{g}_{1P} = \bar{g}_1$ és $\bar{g}_{2P} = \bar{g}_{2C} = \bar{g}_2$, akkor is négy különböző pólus lépne fel: az eredeti $n=1$ -es probléma parkettaközelítésbeli degenerált pólushelyeinek a felhasadásához jutottunk. Emlékeztetünk arra, hogy a BGD megoldásban csak egyetlen, közös, g_1 -gyel meghatározott pólus van. A felhasadást az okozza, hogy most az egyes csatolásokat komponens-térbeli struktúrájuk megkülönbözteti és emiatt a Cooper- és Peierls-csatorna egyes járulékaik nem ejtik ki egymást úgy, mint az $n=1$ -es esetben.

Most térjünk rá a 2. pont tárgyalására. i a továbbiakban ne legyen több dimenzióra vezető szabadsági fokként interpretálva, hanem maradjunk szigorúan 1D-ban. Ekkor i pl. sávindeket jelenthet (*Efetov és Larkin* [49]). Hogyan lehetséges fázisátalakulás 1D rendszerben? Tételezzük fel az egyszerűség kedvéért, hogy $\bar{g}_{1P} = \bar{g}_{2P} = 0$. Ekkor szupravezető MF-típusú instabilitás válik egzakttá és T_c alatti hőmérsékleteken *Gorkov* [50] Green-függvény egyenletei egzaktak. Az energiahézag-függvény

$$\Delta(r) = g k_B T \sum_{\omega_n} \sum_i F_{\omega_n, i}(r, r) \quad (\text{I.4.15})$$

ugyanolyan egyenletnek tesz eleget, mint a megfelelő mennyiség az $n=1$ esetben BCS-közelítésben. Az (I.4.15) egyenletben $F_{\omega_n, i}$ az anomális Green-függvény, melyet itt a részecske keltő operátorok i -ik komponensével definiálunk. A probléma Ψ rendparamétere Δ -val arányos. Levezethető a szokásos módon [51] a Ginzburg—

Landau-egyenlet, mely az

$$F[\Psi(r)] = \int dr \left[a|\Psi|^2 + b|\Psi|^4 + c \left| \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right|^2 \right] \quad (\text{I.4.16})$$

szabadenergia-funkcionál extrémuma. $F[\Psi(r)]$ formálisan olyan, mint $n=1$ esetén. Az a , b és c együtthatók n -rendűek. Az (I.4.16) alak, Ψ egyensúlyi értékét behelyettesítve T_c -hez közel és az $n \rightarrow \infty$ határesetben egzakt.

A fluktuációk csak véges n -ekre érzetik hatásukat. Használjuk (I.4.16)-ot véges nagy n -ekre is közelítésként. Segítségével a jól ismert és a II. 3. pontban részletesen ismertetett módon számolhatunk átlagértékeket. Így a rendparaméter-rendparaméter korrelációs függvényre, *Rice* eredményének [52] általánosításaként a

$$\langle \Psi(r_1) \Psi(r_2) \rangle \sim \left[\Psi_0^2 + \frac{e^{-qR}}{\gamma q} \right] e^{-R/\gamma \Psi_0^2} \quad (\text{I.4.17})$$

kifejezést kapjuk. Itt $q = \xi^{-1} (\xi = \sqrt{c/2|a|})$ és $\gamma = 4c/k_B T = O(n)$. Mivel $\Psi_0^2 = -\frac{a}{2b} = O(1)$, az (I.4.17) egyenlet jobb oldalán a zárójelben a második tag, mely az amplitúdófluktuációkból származik $1/n$ -rendű és így eltűnik az $n \rightarrow \infty$ limitben, minden R -re. Itt nagyon lényeges az $R \rightarrow \infty$ és $n \rightarrow \infty$ limitek sorrendje. Ha a) először $n \rightarrow \infty$, akkor $e^{-R/\gamma \Psi_0^2} \rightarrow 1$ és van hosszútávú rend, összhangban az előzőekben állítottakkal. Másrészt bármely nagy, de véges, n -nél

$$\lim_{R \rightarrow \infty} e^{-R/\gamma \Psi_0^2} = 0 \quad (\text{I.4.18})$$

azaz nincs ODLRO.

Az $n = \infty$ limit körüli $1/n$ sorfejtés nem adná meg a helyes választ az ODLRO tekintetében, ugyanis a $0 < k < 1/n$ intervallumban fekvő k értékekhez kapcsolódó effektusokról nem tudna számot adni. Ugyanez tükröződik a fázisfluktuációkkal renormált rendparaméter

$$\langle \Psi \rangle = \Psi_0 e^{-\frac{2}{\gamma \Psi_0^2 L} \sum_{k > k_{\min}} 1/k^2} \quad (\text{I.4.19})$$

viselkedésében, ha a fenti két határesetet tekintjük. Az a) esetben

$$k_{\min} \simeq \frac{1}{n} < \frac{1}{L}, \quad \sum_{k > k_{\min}} 1/k^2 \simeq Ln$$

és Ln kiesik az (I.4.19) egyenletbeli exponensból, $\langle \Psi \rangle$ véges. Ha viszont a termodinamikai limitet képezzük először, akkor $k_{\min} = 0$ és a \sum -ból kapott integrál divergál, azaz $\langle \Psi \rangle = 0$. Ilyen alakot $1/n$ sorfejtéssel nem tudunk kapni; minden $1/n$ rend felösszegezendő, különben teljesen félrevezető eredmény adódik.

Megjegyezzük, hogy a Bogolyubov egyenlőtlenségen alapuló *Hohenberg*-től [53] származó bizonyítás, melyből következik, hogy 1D-ban nem lehet szupravezető típusú ODLRO ($n=2$), véghezvihető nagy n -ek esetén is és az így általánosított egyenlőtlenség az a) esetben valóban nem zárja ki az ODLRO-t [20].

II. CSATOLT BGD LÁNCOK RENDSZERE — KVÁZIEGYDIMENZIÓS VEZETŐK

1. Gorkov—Dzsalosinszkij-modell csatolt vezető rendszerek fázisátalakulásának leírására

A kváziegydimenziós szerves vezető rendszerek iránti felfokozott érdeklődést a 70-es évek elején végrehajtott ellenállásmérési kísérletek indították el. Az itt használt anyagminta az azóta igen híressé vált TTF—TCNQ-komplex volt, de hasonló viselkedést mutat egy sor egyéb szerves és nem szerves anyag is. Az utóbbiak legjelentősebb képviselője a KCP, mely egy Pt alapú, kevert valenciájú komplex. Mindezen anyagok szálas szerkezetűek és a vezetőképeség fémes jellegű, nagyságrendileg 10^2 – 10^3 (Ω cm) $^{-1}$. A vezetőképeség erős anizotrópiát mutat: láncirányban kb. $(10^2$ – $10^3)$ -szorosa az erre merőleges irányokban mértnek [1]. Továbbá ezek az anyagok látványos, 1D jellegű fázisátmenettel a fémes állapotból dielektromos fázisba kerülnek, melynek jellemzője a $2k_F$ -es töltéssűrűség-hullámok kialakulása és az ún. Peierls-rácsorzulás fellépte. Ez utóbbi a lágy fononmódussal együtt a csatolt elektronrácsrendszer tulajdonsága egy dimenzióban [1]. Ugyanakkor a CDW-állapot kialakulásában a fononok (illetve a rács) legfeljebb közvetve éreztetik hatásukat és világos kép adható a normál vezető \rightarrow CDW-állapot fázisátalakulásról egy tisztán csak elektronokból álló rendszer vizsgálata révén. A BGD-modell [9] természetes módon merült fel a CDW-állapot magyarázatára, hiszen, mint azt az I. pontban leírtuk, az SC instabilitás mellett CDW (és SDW) instabilitást is jósol zérus hőmérsékleten, megfelelő csatolások esetén. A ténylegesen megfigyelt fázisátalakulás véges hőmérsékleten játszódik le ($T_c = 53$ K TTF—TCNQ-ra), és ezért a láncok közötti kölcsönhatás a felelős. Az elektrongáz vizsgálata a láncok közötti csatolással kiegészített 1D BGD-modell alapján — ez volt a kváziegydimenziós rendszerek elméleti tanulmányozásának egyik fő vonala és ehhez csatlakozott az úttörő Gorkov és Dzsalosinszkij [19] nyomán a jelen dolgozat írója is.

Gorkov és Dzsalosinszkij (GD a továbbiakban) egy parallel láncokból álló négyzetes struktúrát tekintettek és feltételezték, hogy elektronvezetés csak a szál irányában van. Ennek megfelelően célszerű egy vegyes reprezentáció használata: az elektronok lineáris impulzusa mellett a rendszert a szálaknak a merőleges síkban elfoglalt helyzetének a megadásával (i, j, k stb.) jellemezzük. A kölcsönhatásmentes elektronok Green-függvénye a hőmérsékleti technikában

$$G_{\alpha\beta}^{ik}(p, \omega_n) = \frac{\delta_{ik} \delta_{\alpha\beta}}{i\omega_n - v(|p| - |p_F|)},$$

ahol $\omega_n = (2n+1)\pi T$.

Az 1D láncokban az elektronok az 1D reciprok rácsban $\left[\left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right) \right]$ a $-k_F$ -től k_F -ig terjedő tartományt töltik be. Ha félig betöltött a sáv, akkor $k_F = \pi/2a$. Ilyen megszorítást GD nem tesz, sőt éppenséggel feltételezik, hogy k_F és π/a nem állnak egész számok segítségével kifejezhető viszonyban (inkommenzurábilisak). A kommenzurábilis specális esetében az Umklapp folyamatokról is számot kell adni; ezek hatását az irodalomban többen vizsgálták [54, 55].

A modell egyszerűen az eredeti BGD-modell az I.4. ponthoz hasonló módon általánosítva, azaz mind a keltő, illetve eltüntető operátorok, mind pedig a kölcsön-

hatási mátrixelemek a lineáris impulzus mellett az i, j stb. szálindeket is viselik és a kölcsönhatás függése ezen indexektől olyan struktúrájú, mint az I.4-beli g_{1P} és g_{2T} . A GD Hamilton-operátor tehát így fest:

$$H = \sum_k \sum_{\alpha i} \varepsilon_k a_{k\alpha i}^+ a_{k\alpha i} + \frac{1}{L} \sum_{ij} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} \times \\ \times [g_1^{ij} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3\beta j} a_{k_4-2k_F\alpha i} + g_2^{ij} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3-2k_F\beta j} a_{k_4\alpha i}]. \quad (\text{I.1})$$

A modell matematikai tárgyalása a parkettaközelítés segítségével történt, akárcsak egydimenzióban. Az ún. mozgó pólus megoldások CDW-típusú, lényegét tekintve egyszerű átlagtér (MF) közelítés jellegű, fázisátmenetet mutattak véges hőmérsékleten. Multiplikatív renormálási csoport módszert alkalmazott a GD-modell vertex-függvényeinek és rezponzfüggvényeinek kiszámítására Mihály és Sólyom [21]. Elsőrendű renormálási csoport közelítésben visszakapták a GD-eredményt, azaz egyszerű MF-et a karakterisztikus rezponzfüggvény és a koherenciahossz kritikus exponenseit illetően, és ebből a szempontból a másodrendű renormálási csoport számításuk sem vezetett eltérő eredményre. További, magasabb közelítések vizsgálata nem látszott már ésszerűen keresztülvihetőnek ezen technika keretében.

A jelen dolgozatban követett eljárás a fentiekől alapvetően különbözik abban, hogy feltételezi és lényegesen kihasználja az erős anizotrópiát, nevezetesen azt, hogy a szálon belüli kölcsönhatások sokkal erősebbek, mint a szálak közöttiek és első lépésként olyan MF-közelítést vezetünk le, amelyben az erősebbnek feltételezett kölcsönhatások a lehetőség szerint egzaktul vannak kezelve.

2. A multiplikatív renormálási csoport módszer alkalmazása a Gorkov—Dzsalosinszkij-modellre

2.1. Általánosított, a láncok közötti kölcsönhatásban elsőrendű multiplikatív renormálási csoport tárgyalás [23]

Az előző pont végén vázolt program végrehajtása érdekében célszerű az (I.1) Hamilton-operátort a

$$H = \sum_i (H_{\parallel i} + H_{\perp i}) \quad (\text{II.2.1})$$

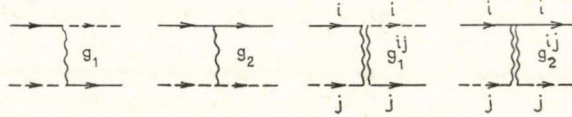
módon felbontani, ahol

$$H_{\parallel i} = \sum_k \sum_{\alpha} \varepsilon_k a_{k\alpha i}^+ a_{k\alpha i} + \frac{1}{L} \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} \times \\ \times [g_1 a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta i}^+ a_{k_3\beta i} a_{k_4-2k_F\alpha i} + g_2 a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta i}^+ a_{k_3-2k_F\beta i} a_{k_4\alpha i}] \quad (\text{II.2.2})$$

az i -ik „szabad” lánc Hamilton-operátora és

$$H_{\perp i} = \frac{1}{L} \sum_j \sum_{k_1, \dots, k_4} \sum_{\alpha\beta} \times \\ \times [g_1^{ij} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3\beta j} a_{k_4-2k_F\alpha i} + g_2^{ij} a_{k_1\alpha i}^+ a_{k_2-2k_F\beta j}^+ a_{k_3-2k_F\beta j} a_{k_4\alpha i}] \quad (\text{II.2.3})$$

az i -ik láncra a többi lánc által kifejtett Coulomb-típusú kölcsönhatás operátora. (II.2.3)-ban $g_1^{ii} = g_2^{ii} = 0$, hiszen, definíció szerint g_1^{ij}, g_2^{ij} csak különböző láncok közötti kölcsönhatást hivatott leírni. A $g_1, g_2, g_1^{ij}, g_2^{ij}$ elemi kölcsönhatásokat grafikususan a 15. ábra mutatja.



15. ábra

Feltételezzük, hogy g_1, g_2 abszolút értékre sokkal nagyobbak, mint g_1^{ij}, g_2^{ij} . Mit jelent a kölcsönhatás fenti választása? g_1^{ij} csatolást létesít különböző láncokon kialakult $2k_F$ -es részecske-lyuk pár-fluktuációk között, azaz a CDW-k csatolását eszközli, akárcsak az I.4. pontbeli g_{1P} kölcsönhatás. g_2^{ij} viszont nem tud 1D CDW fluktuációkat összekapcsolni, inkább két különböző láncban igyekszik $(+k_F, -k_F)$ -es párokat kialakítani. Ez azonban várhatóan sokkal gyengébb effektus, hiszen a láncok csatolása laza és a láncok közötti távolság is lényegesen nagyobb, mint a láncon belüli elemi hosszúság. Az I.4. pont g_{2T} -je (14. ábra) volt i, j -ben ilyen struktúrájú. Mindezek alapján azt várjuk, hogy g_1^{ij} játszik döntő szerepet a fázisátalakulás létrehozásában.

A vertexkorrekciók $g_1, g_2, g_1^{ij}, g_2^{ij}$ -ben másodrendig a következők:

$$\Gamma_1^{ij} = (g_1 \delta_{ij} + g_1^{ij}) + \frac{\ln x}{2\pi v} \times \\ \times (2 \sum_m (g_1 \delta_{jm} + g_1^{jm})(g_1 \delta_{mi} + g_1^{mi}) + 2(g_1 \delta_{ij} + g_1^{ij})(g_2^{ij} + g_2 \delta_{ij} - g_2)), \quad (\text{II.2.4})$$

$$\Gamma_2^{ij} = (g_2 \delta_{ij} + g_2^{ij}) + \frac{\ln x}{2\pi v} (g_1 \delta_{ij} + g_1^{ij})^2. \quad (\text{II.2.5})$$

(II.2.4), (II.2.5)-ből a $g'_1, g'_2, g_1^{ij'}, g_2^{ij'}$ invariáns csatolásokra vonatkozó Lie-egyenletek egyszerűen kaphatók. Az $i=j$ és $i \neq j$ komponensek különválasztásával:

$$\frac{\partial g'_1}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} (2g_1'^2 + 2 \sum (g_1^{im})^2), \quad (\text{II.2.6})$$

$$\frac{\partial g'_2}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} g_1'^2, \quad (\text{II.2.7})$$

$$\frac{\partial g_1^{ij'}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} [2 \sum_m g_1^{im'} g_1^{mi'} + 2g_1^{ij'} (2g'_1 - g'_2) + 2g_2^{ij'} g_1^{ij'}], \quad (\text{II.2.8})$$

$$\frac{\partial g_2^{ij'}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} (g_1^{ij'})^2. \quad (\text{II.2.9})$$

Célszerű lesz az $R_i - R_j$ változó szerinti Fourier-transzformálást elvégezni

$$g_1^{\perp}(q_{\perp}) = \sum_j g_1^{ij} e^{iq_{\perp}(R_i - R_j)}$$

és hasonlóan g_2^{ij} -re is.

Írjuk most fel (II.2.6)–(II.2.9)-et a Fourier-transzformált mennyiségekre, kiegészítve — a későbbiek kedvéért — a g'_1 , g'_2 -ben eggyel magasabb rendű tagokkal is a jobb oldalain:

$$\frac{\partial g'_1}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} \left[2g_1'^2 + \frac{1}{\pi v} g_1'^3 + 2 \int g_1^{\perp \prime 2}(q_\perp) \frac{d^2 q_\perp}{S} \right], \quad (\text{II.2.10})$$

$$\frac{\partial g'_2}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} g_2'^2, \quad (\text{II.2.11})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_1^{\perp \prime}(q_\perp)}{\partial x} = & \frac{1}{2\pi v x} \left\{ \left[2(g_1^{\perp \prime}(q_\perp))^2 + 2(2g'_1 - g'_2) g_1^{\perp \prime} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\pi v} (g_1'^2 + g_2'^2 - g'_1 g'_2) g_1^{\perp \prime} \right] + 2 \int g_1^{\perp \prime}(q'_\perp) g_2^{\perp \prime}(q_\perp - q'_\perp) \frac{d^2 q'_\perp}{S} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{II.2.12})$$

$$\frac{\partial g_2^{\perp \prime}(q_\perp)}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} \int g_1^{\perp \prime}(q'_\perp) g_1^{\perp \prime}(q_\perp - q'_\perp) \frac{d^2 q'_\perp}{S} \quad (\text{II.2.13})$$

ahol $S = \frac{4\pi^2}{d_\perp^2}$ és d_\perp a transzverzális irányú rácsállandó. A (II.2.10)–(II.2.13) egyenletrendszer egyszerűsíteni kívánjuk; ecélből idézzük a Gorkov, Dzsalsinszkij-féle „mozgó pólus” megoldást. Ez a (II.2.12), (II.2.13)-ból g'_1 , g'_2 és a konvolúciók elhagyásával nyerhető

$$\frac{\partial g_1^{\perp \prime}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} 2(g_1^{\perp \prime})^2, \quad (\text{II.2.14})$$

$$\frac{\partial g_2^{\perp \prime}}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.2.15})$$

egyenletekre vonatkozik:

$$(g_1^{\perp \prime})_{\text{GD}} = \frac{g_1^\perp}{1 - \frac{g_1^\perp}{\pi v} \ln x + \frac{1}{2} (q_\perp - q_{\perp 0})^2 / \kappa^2}. \quad (\text{II.2.16})$$

Itt feltételeztük, hogy a csupasz csatolás q_\perp -től való függése az egyszerű

$$g_1^\perp(q_\perp) = \frac{g_1^\perp}{1 + \frac{1}{2} (q_\perp - q_{\perp 0})^2 / \kappa^2} \quad (\text{II.2.17})$$

alakú [19, 21]. $g_1^{\perp \prime}$ pólushelye $q_\perp = q_{\perp 0}$ -nál, $1 = \frac{g_1^\perp}{\pi v} \ln x_c$, definiálja a szokásos értelemben vett MF kritikus hőmérsékletet. T_c közelében

$$g_1^{\perp \prime} \sim \frac{1}{\frac{T - T_c}{T_c} + \frac{1}{2} \frac{(q_\perp - q_{\perp 0})^2}{\kappa^2}} \quad (\text{II.2.18})$$

(II.2.12), (II.2.13)-ban a konvolúciók elhagyásának jogossága T_c közelében most már úgy látható be, hogy (II.2.18)-at (II.2.13) jobb oldalába helyettesítjük és az integrálásokat elvégezzük. $g_2^{\perp'} \sim \ln \frac{T-T_c}{T_c}$ adódik, mely T_c -hez közel elhanyagol-

ható $g_1^{\perp'} \sim \frac{T_c}{T-T_c}$ mellett. Hasonlóan (II.2.12) utolsó tagja is alacsonyabb rendű szingularitást mutat, mint az első.

A most vázolt szelfkonzisztens feltevessel mi is élni kívánunk a továbbiakban. Ha most g_1', g_2' -t ismét bekapcsoljuk az egyenletrendszerünkbe — ami nagyon lényeges —, akkor megállapíthatjuk, (II.2.10), (II.2.11) alapján, hogy g_1', g_2' 1D megoldásához a fenti (II.2.16) alak felhasználásával ismét csak $\ln \frac{T-T_c}{T_c}$ járulék jön. A g_1', g_2' -t meghatározó egyenlet pontos alakja egyáltalán nem lesz érdekes a továbbiakban, amint ezt rövidesen látni fogjuk; annál lényegesebb g_1', g_2' felépése (II.2.12)-ben. (II.2.13) marad továbbra is az egyszerű (II.2.15) formájú, ami már a bevezetésben említett várokozásunkat támasztja alá, hogy $g_2^{ij}(q_2^{\perp}(q_{\perp}))$ szerepe a fázisátalakulás leírásában nem lényeges.

Maradt tehát a (II.2.12) egyenletünk. Ennek átalakításához idézzük fel a $\bar{\chi}_{1D}^{CDW}$ egydimenziós segéd-reszponz (I.3.9)-ben megadott egyenletét. Segítségével (II.2.12), melyben az utolsó tagot az előbb mondottak értelmében elhanyagoltuk, így írható

$$\frac{\partial g_1^{\perp'}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi v x} \left[2(g_1^{\perp'}(q_{\perp}, x))^2 + 2\pi v x g_1^{\perp'}(q_{\perp}, x) \frac{\partial \ln \bar{\chi}_{1D}^{CDW}}{\partial x} \right] \quad (\text{II.2.19})$$

ennek megoldása

$$g_1^{\perp'}(q_{\perp}, T) = \frac{g_1^{\perp}(q_{\perp}) \bar{\chi}_{1D}^{CDW}(T)}{1 - g_1^{\perp}(q_{\perp}) \chi_{1D}^{CDW}(T)}. \quad (\text{II.2.20})$$

Megjegyzésre érdemes, hogy bár a levezetés szerint (II.2.19) csak másodrendű re-normálási csoport közelítésben ekvivalens (II.2.12)-vel (ahol az utolsó tagot természetesen nem számítjuk); várható, hogy minden rendben, megtaláljuk a $\partial \ln \bar{\chi}_{1D}^{CDW} / \partial x$ -nek megfelelő tagokat az infinitezimális generátorban.

(II.2.20) kiértékelésnél feltételezzük, hogy $T/T_{1D} \ll 1$. Ekkor χ_{1D}^{CDW} -re az (I.4) pontban ismertetett

$$\bar{\chi}_{1D}^{CDW} = \Gamma \left(\frac{T}{T_{1D}} \right)^{-\gamma} \quad (\text{II.2.21})$$

alak érvényes és γ az I. táblázatban megadott értékű lehet. (II.2.21)-et (I.4.7)-be téve a

$$\bar{\chi}_{1D}^{CDW} = -\pi v \gamma \chi_{1D}^{CDW} \quad (\text{II.2.22})$$

összefüggést kapjuk.

(II.2.20) nevezőjének eltűnéséből az általánosított MF kritikus hőmérsékletet

$$1 = g_1^{\perp}(q_{\perp 0}) \chi_{1D}^{CDW}(T_{MF}) \quad (\text{II.2.23})$$

adja. $q_{\perp 0}$ az az érték, ahol $g_1^{\perp}(q_{\perp})$ negatív és $|g_1^{\perp}(q_{\perp})|$ maximális (speciális esetben lásd II.2.17-et). A vizsgált anyagoknál $q_{\perp 0} = (\pi/d_{\perp}, \pi/d_{\perp})$, ahol d_{\perp} a \perp irányú rácsállandó. Ilyen $q_{\perp 0}$ -nál maximális és negatív egy taszító legközelebbi szomszéd

kölcsönhatás Fourier transzformáltja ($g_1(q_\perp) = g_1^{ij} \cos q_\perp x$). (II.2.23) és (II.2.21)-ből:

$$T_c^{\text{MF}} = T_{1D} [\Gamma |g_1^\perp|]^{1/2}, \quad (\text{II.2.24})$$

Hasonló formulát más módszerrel Klemm és Gutfreund [22] is származtattak. A formula érdeme, hogy a közönséges MF-elmélet T_c -jénél lényegesen magasabb T_c kapható adott kölcsönhatáserősségek mellett. Diskussziójára a II.3.4. alponthan kerül sor.

A jelen pontban bevezetett tárgyalásmód a következő fizikai képet önti matematikai formába. A fázisátalakulás oly módon jön létre a háromdimenziós rendszerben, hogy a láncok közötti viszonylag gyenge kölcsönhatás az 1D láncokon kialakult erős egydimenziós CDW fluktuációkat még tovább erősítő módon csatolja. Ez bekövetkezhet, ha $g_1^\perp(q_{\perp 0})$ vonzó és az 1D CDW-fluktuációk $T \rightarrow 0$ -ra felerősödnek (γ_{CDW} pozitív). Ha a láncon belüli kölcsönhatást ugyanúgy kezelnénk, mint g_1^\perp -t, akkor (II.2.24) helyett $T_c = \omega_D \exp(-\pi v / |g_1 + g_1^\perp|)$ -t kapnánk, feltéve, hogy $g_1^\perp + g_1 < 0$ és egyébként nem adódnék fázisátmenet. — Ezzel tehát kizárnánk azt a fontos esetet, amikor $g_1 > 0$, $|g_1^\perp| < g_1$ és $\gamma = 2g_2 - g_1 > 0$ [23].

2.2. 1D—3D átmenet (crossover)

A $g_1^\perp(q_\perp)$ -re nyert (II.2.20) egyenlet szépen illusztrálja az 1D \rightarrow 3D „crossover” jelenségét.

Mit jelent ez?

Egydimenziós rendszerben, rövid távú erők esetében, nem lehetséges véges hőmérsékleten fázisátalakulás, csak erős, rövid távú, (a BGD-modellben szupra-vezető, töltéssűrűség-hullám és spinsűrűség-hullám jellegű) korrelációk alakulhatnak ki, $T=0$ felé haladva egyre erősebben. Érvényesülésük többé-kevésbé zavartalan egy jelentős hőmérsékleti tartományban ($T_c \ll T < T_{1D}$) ha a láncok közötti kölcsönhatás gyenge. Elég alacsony hőmérsékleten azonban kezd bekapcsolódni a láncok közötti csatolás (már érezhető a fázisátalakulás tendenciája $T \neq 0$ -n), míg az egyes láncok 1D viselkedése is érvényesül még. Ez az említett „crossover” tartomány. Alacsonyabb hőmérsékleten, azaz T_c -hez közelebb már azután a láncok minden önállóságukat elvesztik és igazi 3D helyzet alakul ki. A valóságban a vizsgált rendszerekben levő szennyezések hajlamosak a „crossover” helyzet befagyasztására. Erre a kérdésre a III. fejezetben részletesen visszatérünk.

(II.2.20)-ban az egydimenziós határesetet nyilvánvalóan a

$$g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} \ll 1 \quad (\text{II.2.25})$$

feltétellel kapjuk meg. Ekkor

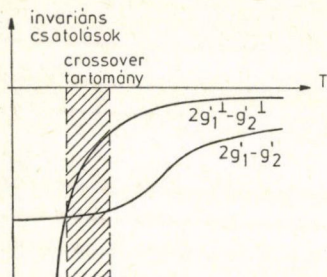
$$g_1^{\perp'} \sim g_1^\perp \bar{\chi}_{1D}^{\text{CDW}} \quad (\text{II.2.26})$$

azaz $g_2^{\perp'}$ -t ilyen magas hőmérsékletről „nézve” az még $T=0$ -nál látszik szingulárisnak.

A „crossover” hőmérséklet definíciója legyen azzal adva, hogy T_{cro} -n

$$2g_1' - g_2' = 2g_1^{\perp'} - g_2^{\perp'}|_{T_{\text{cro}}}. \quad (\text{II.2.27})$$

Az így megadott átmeneti tartományt a 16. ábra mutatja (bevonalkázva).



16. ábra

Azért választottuk (II.2.27)-ben a $2g_1 - g_2$ kombinációt, mert ez releváns a töltéssűrűség-hullám rezponz szempontjából. A (II.2.20), (II.2.21) és (II.2.27) egyenletekből, g'_1, g'_2 -t konstansnak tekintve

$$T_{\text{cro}} = T_{\text{MF}} \left[\frac{2\pi v \gamma}{|2g'_1 - g'_2|} + 1 \right]^{1/\gamma} \quad (\text{II.2.28})$$

kapható. Ez T_{cro} -nak csak egy lehetséges definíciója, később majd egyéb, ezzel többé-kevésbé ekvivalens definíció is fog szerepelni.

$T \simeq T_{\text{cro}}$ -ra a g_1^{\perp} kifejezés, (II.2.20), T_{MF} -nél szinguláris volta kezd érezhetővé válni. Ezzel vált a rendszer 1D-ből 3D-be.

Könnyű belátni, hogy g_1^{\perp} szingularitása a csatolt rendszer CDW szuszceptibilitásának (válaszfüggvényének) pólusaként érvényesül

$$\chi_{3D}^{\text{CDW}} \sim \frac{1}{T - T_{\text{MF}}} \quad (\text{II.2.29})$$

amint az várható is, hiszen átlagtér-közelítésben számoltunk. A többi típusú (SC, SDW) válaszfüggvény nem mutat hasonló felerősödést. Ez jelzi a rendszer tendenciáját a CDW-típusú fázisátalakulásra.

2.3. Spinsűrűség-hullám korrelációk gyengülése a Peierls-átmenet közelében [34]

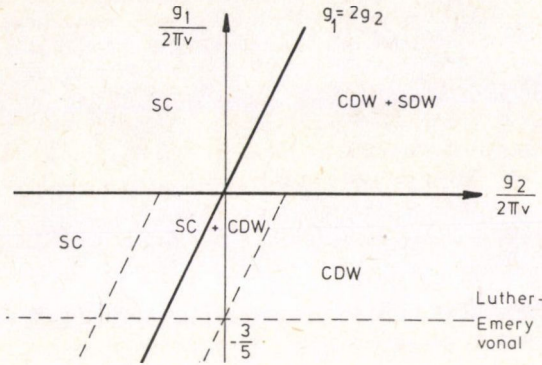
Az előző pontban bemutattuk, hogy ha az 1D rendszer olyan, hogy benne a töltéssűrűség hullám korrelációk $T=0$ felé haladva növekednek, azaz a $\chi_{1D}^{\text{CDW}}(T)$ válaszfüggvény, melyre a (II.2.21) alakot fogadtuk el érvényesnek, $T=0$ -nál divergál (γ pozitív), akkor az 1D láncok között ható kölcsönhatás viszonylag magas hőmérsékleten a rendszerben Peierls (CDW) átalakulást eredményez. A töltéssűrűségeket a szomszédos láncokon összecsatoló kölcsönhatás tehát úgy hat, hogy az 1D rendszerben magasabb hőmérsékleteken szabadon érvényesülő CDW fluktuációkat felerősíti és egy véges hőmérsékleten divergenssé teszi. A BGD-modellt helyesnek elfogadva azonban $T < T_{1D}$ -nél a CDW mellett SC vagy SDW korrelációk is fellépnek, amint ezt az I.4. pontban leírtuk, a g_1, g_2 csatolási állandók relatív nagyságától és előjelétől függően. A fázisdiagramot a 17. ábra mutatja [32].

Mi történik ezen korrelációkkal, amikor a hőmérséklet felülről a CDW-átmenet hőmérsékletét megközelíti?

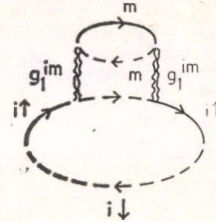
A CDW + SDW koegzisztencia esetét fogjuk szemügyre venni; a CDW + SC eset teljesen hasonlóan tárgyalható. A módszer ismét a multiplikatív renormálási csoport közelítési sémája lesz. Az SDW válaszfüggvény definíciója

$$\chi_{ii}^{\text{SDW}}(k, \omega_v) = -\frac{1}{L} \int d\tau \exp(i\omega, \tau) \times \\ \times \left\langle T_{\tau} \left[\int \frac{dp}{2\pi} a_{p+ki}^{\dagger}(\tau) a_{p+ki}(\tau) \int \frac{dp'}{2\pi} a_{p'+ki}^{\dagger}(0) a_{p'-ki}(0) \right] \right\rangle \quad k \simeq 2k_F. \quad (\text{II.2.30})$$

$\chi_{ij}^{\text{SDW}}=0$, ha $i \neq j$, mivel a láncok közötti kölcsönhatás olyan hogy csak sűrűségeket csatol össze, spinsűrűségeket már nem. (II.2.30)-ban $\omega_v=(2v+1)\pi T$. A hőmérsékletfüggő válaszfüggvényt az itt megadott korrelációs függvényből a felső félsíkra való analitikus folytatás révén nyerhetjük. A multiplikatív renormálási



17. ábra



18. ábra

csoport közelítés χ_{ii}^{SDW} -re ismét csak nem alkalmazható közvetlenül; a logaritmikus deriváltja azonban már megfelelő.

$$\bar{\chi}_{ii}^{\text{SDW}} = -2\pi v \frac{\partial \chi_{ii}^{\text{SDW}}}{\partial \zeta}, \quad \zeta \equiv \ln x$$

másodrendű renormálási csoport közelítésben a következő Lie-egyenletből határozandó meg:

$$\frac{\partial \chi_{ii}^{\text{SDW}}}{\partial \zeta} = -\frac{g'_2}{\pi v} + \frac{1}{2\pi^2 v^2} \{g_1'^2 + g_2'^2 - g'_1 g'_2 + \sum_m [(g_1^{im'})^2 + (g_2^{im'})^2]\}. \quad (\text{II.2.31})$$

Az egyenlet jobb oldalának a g -kben másodrendű tagjai sajátenergiás betétrészt viselő χ_{ii}^{SDW} -diagramokból jönnek; ezek egyikét a 18. ábra mutatja.

A számolásnál ismét az erős anizotropia

$$|g_1^\perp(q_\perp)| \ll |g_1|, |g_2|$$

feltevésével élünk. Ennek értelmében g'_1, g'_2 -re közelítőleg a nemcsatolt rendszer eredményeit használjuk fel. Ha $g_1 > 0, 2g_1 - g_2 > 0$, ami a koegzisztáló CDW + SDW-nek a lehetőségét jelentő feltétel (l. 17. ábra), akkor az I.3. pont eredményei alapján

$$g'_1(x) \rightarrow 0, \quad g'_2(x) \rightarrow g_2 - \frac{1}{2} g_1,$$

ha $x = T/\omega_D \rightarrow 0$. Továbbá felhasználjuk (II.2.20) eredményünket $g_1^\perp(q_\perp)$ -re, $g_1^\perp(q_\perp)$ -t ismét az egyszerű (II.2.17) formában véve fel. Az utóbbiban szereplő κ^{-1} paraméter a láncok közötti kölcsönhatás effektív hatótávolságával, s -sel, arányos: $\kappa^{-1} = d_\perp s$. Pl. legközelebbi szomszéd kölcsönhatás esetén $\kappa = \sqrt{2}/d_\perp$, ahol

d_{\perp} a láncok közötti távolság. Így kapjuk, hogy

$$2 \sum_m (g_1^{im})^2 = \frac{1}{2\pi s^2} g_1^{\perp}(q_{\perp 0}) \bar{\chi}_{1D}^{\text{CDW}} g_1^{\perp'}(q_{\perp 0}, T) =$$

$$= \frac{(\pi v \gamma)^2}{2\pi s^2} \frac{(T/T_{MF})^{-2\gamma}}{1 - (T/T_{MF})^{-\gamma}} \quad (\text{II.2.32})$$

(II.2.32)-ben a

$$g_1^{\perp} \chi_{1D}^{\text{CDW}} = (T/T_{MF})^{-\gamma}$$

összefüggést használtuk fel, mely T_{MF} definíciójából és (II.2.21)-ből kapható. Az I.4. pont 1. táblázata szerint, továbbá a taszító esetben

$$\frac{1}{\pi v} (2g_2 - g_1) \simeq \gamma$$

így $g_2'(x) \rightarrow \pi v \gamma$, ha $x \rightarrow 0$. Mindezekkel a (II.2.31) Lie-egyenlet a

$$\frac{\partial \ln \bar{\chi}_{ii}^{\text{SDW}}}{\partial \xi} = -\gamma + \frac{1}{2} \gamma^2 + \frac{\gamma^2}{8\pi s^2} \frac{(T/T_{MF})^{-2\gamma}}{1 - (T/T_{MF})^{-\gamma}} \quad (\text{II.2.33})$$

alakot ölti. Ennek megoldása

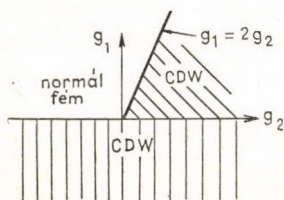
$$\bar{\chi}_{ii}^{\text{SDW}} = C T^{-\gamma + \frac{\gamma^2}{2}} \left[1 - \left(\frac{T}{T_{MF}} \right)^{-\gamma} \right]^{\frac{\gamma}{8\pi s^2}} \exp [(\gamma/8\pi s^2)(T/T_{MF})^{-\gamma}], \quad (\text{II.2.34})$$

melyből a $T \simeq T_{MF}$, azaz $1 - \left(\frac{T}{T_{MF}} \right)^{-\gamma} \simeq \gamma t$ közelítésben

$$\bar{\chi}_{ii}^{\text{SDW}} \sim t^{\frac{\gamma}{8\pi s^2}}, \quad \left(t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \right). \quad (\text{II.2.35})$$

Eredményünk tehát azt mutatja, hogy $\bar{\chi}_{ii}^{\text{SDW}}(T)$ T_c közelében csökken, majd eltűnik T_c -nél $(T - T_c) \gamma/8\pi s^2$ hatványa szerint. Hasonló viselkedés érvényes magára χ_{ii}^{SDW} -re is, és ez olyan, mint amit fizikailag vártunk is. A hatványkitevő értékére $\gamma \simeq 1$ -nél $s^2 = 1/2$ mellett (legközelebbi szomszéd kölcsönhatás) $1/4\pi$ adódik.

A (II.2.35) összefüggést illetően néhány megjegyzés helyénvaló. Ezt az eredményt (II.2.34)-ből extrapoláltuk annak érvényességi tartományán kívülre. Ugyanis a (II.2.33) Lie-egyenlet jobb oldalát perturbációs számításból vettük, és így szükséges,



19. ábra

hogy a magasabbrendű tagok kisebbek legyenek, mint az alacsonyabb rendűek. A $t \rightarrow 0$ -ra domináns tag azonban éppen a 18. ábra másodrendű diagramjából jön. Így azután csak annyit jogosult (II.2.35)-höz kommentárként hozzáfűznünk, hogy az eredmény a rendszer viselkedésének tendenciáját helyesen tükrözi, kvantitatív értelemben azonban nem szabad komolyan venni; ez vonatkozik a hatványkitevő fenti értékére.

Végül is a fázisdiagramot illetően a következő konk-

lúziót vonhatjuk le a II.2.3. pont „crossover” képe és a jelen pont eredménye alapján: míg magas hőmérsékleten, $T \simeq T_{1D}$ -nél a csatolt rendszer fázisdiagramja az 1D rendszer 17. ábrán lerajzolt fázisdiagramjával egyezik meg többé-kevésbé, addig a „crossover” hőmérséklet alatt a kép gyökeresen megváltozik és a 19. ábra fázisdiagramja válik érvényessé.

3. Kvázi-1D vezetők általánosított Landau és Ginzburg—Landau-elmélete

3.1. A szabadenergia levezetése és MF-elmélet [33]

Az MF-elmélet abban a formájában, ahogy azt Landau 1937-ben a másodrendű fázisátalakulások leírására megalkotta, a rendparaméter fogalmának bevezetésén alapszik. Landau feltételezte, hogy T_c közelében a rendszer egyensúlyi tulajdonságai egy, a rendparamétertől függő általánosított Gibbs-szabadenergia függvényből kaphatók; ennek minimuma adja a rendparaméter egyensúlyi értékét és az egyensúlyi szabadenergia, entrópia stb. már ezzel kifejezve kapható. Ha a rendparaméter egyensúlyi értéke térben lassan változó, akkor az említett állapotegyenlet az ún. Ginzburg—Landau-egyenletbe megy át. Az eredetileg fenomenologikus egyenletek mikroszkopikus elmélet alapján leszármaztathatók és így az egyenletekben szereplő együttthatók és rajtuk keresztül a rendszer termodinamikai jellemzői meghatározhatók.

Az egyensúlyi érték körüli fluktuációk hatását úgy számíthatjuk a Ginzburg—Landau-funkcionál ismeretében, hogy az F szabadenergia funkcionált konfigurációs energiának tekintve $e^{-F/k_B T}$ alakban írjuk fel egy adott rendparaméter konfiguráció termodinamikai valószínűségét és számoljuk az állapotösszeget az összes lehetséges rendparaméter-konfigurációra való összegezéssel.

A jelen pontban a csatolt BGD-láncok rendszerének Landau, ill. Ginzburg—Landau-elméletét akarjuk származtatni. Lazán csatolt Ising, illetve Heisenberg-láncok rendszerének MF-elméletét Scalapino, Imry és Pincus [56] dolgozták ki 1975-ben olyan általánosított formában, hogy az erős, láncon belül ható erőket egzaktul kezelték és csak a láncok közötti, lényegesen gyengébb kölcsönhatásban alkalmaztak átlagtér-közelítést. Mi is hasonló utat követünk a továbbiakban, a jelen probléma tárgyalására és ez megfelel a II.2. pontban követett renormálási csoport közelítés szellemének. A végső célunk természetesen nem a MF-elmélet újrászámaztatása, hanem a MF-átmenet környezetére kidolgozható fluktuációs elmélet (l. a II. 3.3. alpontot).

Tekintsük a (II.2.1)—(II.2.3) Hamilton-operátort. Vezessük be a CDW rendparamétert a következő definícióval

$$\Psi_i(k) = \langle \hat{\Psi}_i(k) \rangle \quad (\text{II.3.1})$$

$$\hat{\Psi}_i(k) = \frac{1}{L} \sum_{k', \beta} a_{k'-2k_F-k\beta i}^\dagger a_{k' \beta i}. \quad (\text{II.3.2})$$

A $\hat{\Psi}_i(k)$ operátor egy $2k_F$ -körüli impulzus részecske-lyuk pár keltését eszközli. A $\langle \rangle$ átlag a szimmetriasértő fázisra értendő. Megjegyezzük, hogy a Hamilton-operátor jellege miatt

$$\langle a_{k'-2k_F-k\beta i}^\dagger a_{k' \beta j} \rangle = 0, \quad \text{ha } i \neq j.$$

Ezután a (II.2.3) kölcsönhatási Hamilton-operátort írjuk át:

$$H_{\perp i} = L \sum_j g_1^{ij} \hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_j + K(g_2^{ij}),$$

ahol $K(g_2^{ij}) \hat{\Psi}_i$ -vel közvetlenül nem fejezhető ki; ez $H_{\perp i}$ -nek a g_2^{ij} -t tartalmazó része. Ennek $i=j$ -s komponensét még át tudnánk $\hat{\Psi}_i$ -pal írni, azonban feltevés szerint $g_2^{ii}=0$. Így hát a MF közelítésünkben a g_2^{ij} -t tartalmazó tag eleve fel sem lép (vö. a (II.2.15) egyenlettel). Írjuk továbbá

$$\hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_j \simeq \hat{\Psi}_i^+ \Psi_j + \hat{\Psi}_j \Psi_i^* - \Psi_j \Psi_i^*$$

és vegyük figyelembe a rendparaméterhez termodinamikailag konjugált $h_i(k)$ teret is a $H_{\perp i}^{MF}$ Hamilton-operátor felírásánál

$$H_{\perp i}^{MF} = L \sum_k \left[\sum_j g_1^{ij} \Psi_j(k) + h_i(k) \right] \hat{\Psi}_i^+(k) + \text{h.c.}, \quad -L \sum_k \sum_j g_1^{ij} \text{Re} \Psi_i(k) \Psi_j^*(k). \quad (\text{II.3.3})$$

Ezután Fourier-transzformálást hajtunk végre

$$g_1^{ij} = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{q_{\perp}} g_1^{\perp}(q_{\perp}) e^{-iq_{\perp}(R_i - R_j)} \quad (\text{II.3.4})$$

és hasonlóan $\Psi_j(k)$, $h_i(k)$ -ra is. Így lesz

$$H_{\perp}^{MF} = \sum_i H_{\perp i}^{MF} - \text{konst.}, \quad (\text{II.3.5})$$

$$H_{\perp i}^{MF} = \frac{L}{N_{\perp}} \sum_k \sum_{q_{\perp}} [g_1^{\perp}(q_{\perp}) \Psi(k, q_{\perp}) + h(k, q_{\perp})] \hat{\Psi}_i(k) e^{iq_{\perp} R_i} + \text{h.c.},$$

$$\text{konst} = L N_{\perp}^{-1} \sum_k \sum_{q_{\perp}} g_1^{\perp}(q_{\perp}) |\Psi(k, q_{\perp})|^2$$

$(h + g_1^{\perp} \Psi)$ effektív, konjugált tér szerepét játssza. Ezzel a problémát visszavezettük egydimenziós BGD problémára effektív tér jelenlétében. Az 1D Fermi-gáz esetében, ellentétben pl. az 1D Ising-moddal, külső, „konjugált” tér jelenléte esetére semmilyen megoldás nem ismert; még közelítő számítás sem történt ilyen irányban. Ezért azután nem tudjuk a szokásos [54] eljárást követni, az egzaktul kiszámított szabadenergiát a rendparaméter hatványai szerint haladó sorba fejteni a Ginzburg—Landau-alak származtatása érdekében. Ehelyett már a szabadenergia kiszámításánál sorfejtést alkalmaztunk; azt az effektív konjugált térben negyedrendig számítottuk ki oly módon, hogy H_{\parallel} -t perturbálatlan Hamilton-operátorként, H_{\perp}^{MF} -et pedig perturbációként kezeltük. A jól ismert formula alkalmazható itt a Gibbs-potenciálra (Abrikosov, Gorkov, Dzsalsinszkij [57])

$$G = G_{\parallel} - T \left[\left\langle \exp \left(- \int_0^{1/T} H_{\perp}^{MF}(\tau) d\tau \right) \right\rangle_{D, \text{conn}} - 1 \right], \quad (\text{II.3.6})$$

ahol $\langle \rangle_0$ a perturbálatlan állapotokra való átlagolást jelöli és a conn. arra utal, hogy a járulékok kiszámításánál csak az összefüggő (connected) gráfokra kell szorítkoznunk. τ imaginárius időargumentum, G_{\parallel} az 1D rendszer külső tér nélküli esetre vett szabadenergiája. Meg kell itt jegyeznünk, a félreértések elkerülése végett,

hogyan t.k. H_{\parallel} is átírható lenne $\hat{\Psi}$ -val. Ezt nem tettük meg, mert valójában $g_1^{\perp} \langle \hat{\Psi} \rangle$ az igazi kifejtési paraméter és hogy a rendparaméterbe g_1^{\perp} -t nem definiáltuk bele, az csak célszerűségi okokból történt.

A számolás legalacsonyabban másodrendben ad zérustól különböző járulékokat, hiszen $\langle \hat{\Psi} \rangle_0 = 0$. Ilyen rendben

$$\sum_i \sum_{q_{\perp}, q'_{\perp}} e^{i(q_{\perp} - q'_{\perp})R_i} \langle \hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_i \rangle_0 g_1^{\perp}(q_{\perp}) g_1^{\perp}(q'_{\perp}) \Psi(q_{\perp}) \Psi^*(q'_{\perp})$$

-t kapunk, ahol $\langle \hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_i \rangle$ i -től független és így

$$N_{\perp} \sum_{q_{\perp}} \langle \hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_i \rangle |g_1^{\perp}(q_{\perp}) \Psi(q_{\perp})|^2$$

adódik. $\langle \hat{\Psi}_i^+ \hat{\Psi}_i \rangle$, pontosabban kiírva

$$R_{1D}^{(2)} \equiv \int_0^{1/\tau} \langle T_{\tau} \hat{\Psi}_i^+(k, \tau) \hat{\Psi}_i(k, 0) \rangle d\tau, \quad (\text{II.3.7})$$

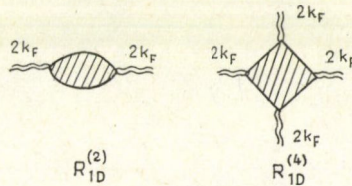
a CDW rezponz I.4-ben megadott definícióját felidézve $-\chi_{1D}^{\text{CDW}}(k)$ -val arányos. Nem ilyen egyszerű a helyzet negyedrendben, amikor is

$$R_{1D}^{(4)} \equiv L^4 \int \dots \int \langle T_{\tau} \hat{\Psi}^+(\tau_1) \hat{\Psi}(\tau_2) \hat{\Psi}^+(\tau_3) \hat{\Psi}(\tau_4) \rangle d\tau_1 \dots d\tau_4 \quad (\text{II.3.8})$$

jön elő $|h + g_1^{\perp} \Psi|^4$ szorzójaként. Itt a különböző i, j, k, l és k_1, \dots, k_4 indexeket nem írtuk ki. $i = j = k = l$ kell legyen, mert H_{\parallel} nem hoz létre átmenetet különböző i -k között és az átlagképzés H_{\parallel} -sal történik. Ami a k -kat illeti, a Ginzburg—Landau-elmélet szellemében a negyedrendű tagban a k -függés elhagyható és így a számolást $k_i = 0$ -nál ($i = 1, \dots, 4$) végeztük.

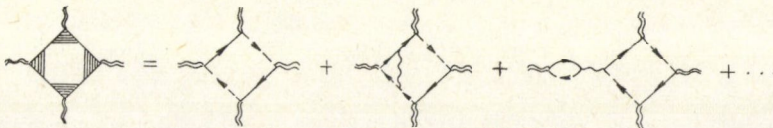
(II.3.8) kiértékelésénél már közelítésre vagyunk kényszerítve. $R_{1D}^{(2)}$ -t és $R_{1D}^{(4)}$ -t a 20. ábrán ábrázoltuk. Az 1D szabad Fermi-gáz speciális esetén a négyszög gráf járuléka:

$$R_{1D}^{(4)0} = -\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} \frac{L}{2\pi v T}. \quad (\text{II.3.9})$$



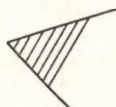
20. ábra

Az $R_{1D}^{(4)}$ számítása parkettaközelítés segítségével történt, a 21. ábra diagramja alapján.



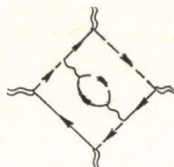
21. ábra

Az itt szereplő vertexek ugyanazok, mint a II.4. pontbeli 12. ábra vertexei, azaz



$$\simeq n(2k_F, \xi) = (\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^{1/2}.$$

Az alkalmazott közelítés csak olyan értelemben parketta szellemű, hogy pl. a 22. ábrán látható



22. ábra

gráf járulékát, mely $(g_1/2\pi v)^2 \ln x$ -szel arányos, elhanyagoljuk, ami vezető logaritmikus közelítésben jogos (vezető logaritmikus közelítésben $g_1/2\pi v \cdot \ln x \sim 1$ -nek van tekintve és $g_1/2\pi v \ll 1$ miatt $\frac{g_1^2}{4\pi^2 v^2} \ln x \ll 1$). Ugyanekkor azonban a



vertex $(\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^{1/2}$ járulékához $\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}}$ -t nem logaritmikus közelítésből

vesszük, hanem az I.4. pontbeli hatványfüggvény alakot használjuk fel, mely többé-kevésbé egzaktak számít.

A négyszög gráf járuléka a vázolt közelítésben

$$\int dk_1 \sum_{\omega_1} n^4(T, k_1, \omega_1) G^2(k_1 \omega_1) G^2(k_1 - 2k_F, \omega_1), \quad (\text{II.3.10})$$

ahol G itt a hőmérsékleti Green-függvény [57]. A k_1 -re való integrálás és az ω_1 -re való összegezés nem logaritmikus (ami abból is nyilvánvaló, hogy a nullarendű négyszög járuléka véges konstans) és ezért $n^4(T, k_1, \omega_1)$ kiemelhető az integráljel alól. Az eredmény

$$R_{\text{ID}}^{(4)} \simeq -(\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^2 \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} \frac{L}{2\pi v T}. \quad (\text{II.3.11})$$

Megjegyezzük, hogy a (II.3.11) eredmény Lie-egyenlet segítségével is leszarmaztatható.

Ezekután felírhatjuk eredményünket a Gibbs-féle szabadenergiára

$$G = G_{\parallel} - \frac{L}{N_{\perp}} \sum_k \sum_{q_{\perp}} \left[g_1^{\perp}(q_{\perp}) \Psi(k, q_{\perp})|^2 - \right. \\ \left. - \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(k + 2k_F) |g_1^{\perp} \Psi + h|^2 - \frac{1}{N_{\perp}^2} (\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^2 \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} \frac{1}{2\pi^2} |g_1^{\perp} \Psi + h|^4 \right]. \quad (\text{II.3.12})$$

Jól ismeretes, hogy a Gibbs-féle szabadenergiában h a független paraméter és Ψ -t származtatnunk kell. Természetesen Ψ -re így szelfkonzisztensen megoldandó

egyenletet kapunk, hiszen Ψ szerepel a jobb oldalon is ($g \equiv N_{\perp} G/L$)

$$\Psi = \frac{\partial g}{\partial h^*} = \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(g_{\perp}^{\perp} \Psi + h) + \frac{2}{N_{\perp}^2} \frac{(\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^2}{2\pi v} \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} |g_{\perp}^{\perp} \Psi + h|^2 (g_{\perp}^{\perp} \Psi + h). \quad (\text{II.3.13})$$

Ez az állapotegyenlet. $h=0$ esetén

$$[1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}] \Psi - \frac{2}{N_{\perp}^2} \frac{(\bar{\chi}_{\text{ID}}^{\text{CDW}})^2}{2\pi v} \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} (g_{\perp}^{\perp})^3 |\Psi|^2 \Psi + 0. \quad (\text{II.3.14})$$

Az átalakulási pontban $\Psi=0$, ami a

$$|g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp 0}) \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(2k_F, T_{\text{MF}})| = 1 \quad (\text{II.3.15})$$

feltétel teljesülése esetén következik be. Ez pontosan megegyezik a II.2 pontbeli (II.2.23) egyenlettel: a jelen MF leírás ekvivalens a Lie-egyenlet segítségével az előzőekben kapottal.

$T > T_{\text{MF}}$ -re az állapotegyenletből a rendszer CDW szuszceptibilitása (válasza):

$$\frac{\Psi}{h} = \chi^{\text{CDW}} = \frac{\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}}{1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}} \sim \frac{1}{T - T_{\text{MF}}}, \quad (\text{II.3.16})$$

ahol az utolsó arányosság $g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{ID}} \approx 1$ esetén áll fenn. Ezek a MF elmélet eredményei. Kérdés, hogy miként tudunk a MF -közelítésen túlmenni, a fluktuációkat is figyelembe venni? Egyik lehetőség a mikroszkopikus eljárás, azaz a renormálási csoport módszer alkalmazásának magasabb rendben való folytatása lenne. Erre történt próbálkozás Mihály és Solyom részéről [21], akik izotrop módon, azaz minden irányban egyforma közelítést alkalmazva, számolták másodrendű renormálási csoport közelítésben a csatolt problémát — és a MF -eredmények lényegében nem változtak ilyen rendig. Ezen túlmenni viszont már nem nagyon érdemes a számítás várható nagy nehézségei miatt. A másik lehetőség, amelyet megpróbálhatunk — és ezt is tesszük a következőkben — a szupravezető fluktuációk elméletének példáját szem előtt tartva egy szemimikroszkopikus Ginzburg—Landau-szkéma megkonstruálása és a fluktuációknak a jól ismert módon [58] ezen belül való kezelése.

3.2. Általánosított Ginzburg—Landau-elmélet [33]

A Ginzburg—Landau-szkémára való áttérés menete a következő. 1. Az átlagteret lassú térbeli változással rendelkező rendparaméterrel helyettesítjük, melynek a konfigurációs energiáját Ginzburg—Landau-funkcionál adja; 2. Az energia-funkcionál segítségével a rendparaméter tér statisztikus mechanikáját ezután úgy kapjuk, hogy funkcionál integrálást hajtunk végre az összes lehetséges rendparaméter konfigurációra. Ez utóbbi lépés általában csak közelítőleg hajtható végre.

1. keresztülvitelénél tekintettel kell lennünk arra a körülményre, hogy a II.3.1.-ben bevezetett Ψ Fourier-transzformáltjának $\tilde{\Psi}$ -nak egyensúlyi értéke, $\tilde{\Psi}_0$, a transzverzális irányokban gyors térbeli változást mutat, ha a rendszerben kialakuló sűrűség-hullámok hullámmzása ezen irányokban is zérustól különböző. Ezt a gyors változást leválasztjuk

$$\tilde{\Psi}_0 = e^{iq_{\perp 0} x_{\perp}} \tilde{\psi}_0$$

és ezután a $\tilde{\psi}$ mennyiséggel dolgozunk, mely már olyan, hogy egyensúlyban térben állandó az értéke és az egyensúlytól kissé eltérve lassú térbeli változást mutat, $\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(x_{\parallel}, \mathbf{x}_{\perp})$, és egy adott $\tilde{\psi}$ -vel jellemzett rendparaméter konfiguráció energiája:

$$F[\psi] = \frac{1}{d^3x} \int d^3x \left[A |\tilde{\psi}(x)|^2 + B |\tilde{\psi}(x)|^4 + C_{\parallel} \left| \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x_{\parallel}} \right|^2 + C_{\perp} |\nabla_{\perp} \tilde{\psi}|^2 - \text{Re } h \tilde{\psi} \right], \quad (\text{II.3.17})$$

mely kifejezésben $\tilde{\psi}$ és h egyaránt független változók és az állapotegyenletet $F \tilde{\psi}$ -szerinti minimalizálása adja. A homogén esetben és tér nélkül a minimumfeltétel

$$A \tilde{\psi}_0 + 2B |\tilde{\psi}_0|^2 \tilde{\psi}_0 = 0 \quad (\text{II.3.18})$$

(II.3.17) együtthatóinak leszámaztatása (II.3.12) alapján történik. Nyilvánvaló, hogy a gradienst tartalmazó tagok egyrészt $g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp})$ -nek $q_{\perp 0}$ körüli $(q_{\perp} - q_{\perp 0})$ -függéséből, valamint $\chi_{1D}(k + 2k_F)$ k -függéséből jönnek. A kifejtés:

$$g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp}) = g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp 0}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp})}{\partial q_{\perp}^2} \right)_{q_{\perp}=q_{\perp 0}} (q_{\perp} - q_{\perp 0})^2 + \dots \quad (\text{II.3.19})$$

$$\chi_{1D}(k + 2k_F) = \chi_{1D}(2k_F) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \chi_{1D}}{\partial k^2} \right)_{k=0} k^2 + \dots \quad (\text{II.3.20})$$

(II.3.12)-t koordináta térbe kell Fourier transzformálnunk. Jelölések: $q_{\perp} - q_{\perp 0} \equiv q'_{\perp}$ és $\tilde{\psi}(x) \psi(k, q'_{\perp})$ Fourier-transzformáltja. Az állapotegyenlet koordinátatérbeli megfelelője:

$$\tilde{\psi} = \chi_{1D}^{\text{CDW}}(g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp 0}) \tilde{\psi} + \tilde{h}) + 2 \frac{(\tilde{\chi}_{1D}^{\text{CDW}})^2}{2\pi v} \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} |g_{\perp}^{\perp} \tilde{\psi} + \tilde{h}|^2 (g_{\perp}^{\perp} \tilde{\psi} + \tilde{h}) \quad (\text{II.3.29})$$

(II.3.21)-et $\tilde{h}=0$ esetén (II.3.18)-cal összehasonlítjuk az együtthatók azonosítása végett. A két egyenlet egy konstans szorzóban különbözhet és ezt a szorzót az rögzíti, hogy

$$A = (\chi^{\text{CDW}})^{-1}$$

kell legyen a jól ismert módon, a fluktuációs-dissipációs tétel értelmében [58]. Így tehát

$$A = - \frac{1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{1D}^{\text{CDW}}}{\chi_{1D}^{\text{CDW}}}, \quad (\text{II.3.30})$$

$$B = \frac{-1}{2\pi v} \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} \frac{(\tilde{\chi}_{1D}^{\text{CDW}})^2}{\chi_{1D}^{\text{CDW}}} |g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp 0})|^2 \simeq - \frac{\pi v}{2} \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T^2} \gamma^2 |g_{\perp}^{\perp}|^2 \chi_{1D}^{\text{CDW}}, \quad (\text{II.3.31})$$

$$C_{\parallel} = - \frac{\gamma}{2\chi_{1D}^{\text{CDW}}} \left(\frac{v}{\pi T} \right)^2, \quad (\text{II.3.32})$$

$$C_{\perp} = \frac{1}{2} |g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp 0})| R_{\text{eff}}^2 \quad (\text{II.3.33})$$

itt R_{eff} a láncok közötti kölcsönhatás effektív hatótávolsága

$$R_{\text{eff}}^2 = \left| \frac{\partial^2 g_1(q_{\perp})}{\partial q_{\perp}^2} \right|_{q_{\perp}=0} \frac{1}{|g_1^{\perp}(q_{\perp 0})|}. \quad (\text{II.3.34})$$

A γ faktorok fellépte a $\chi_{1D}^{\text{CDW}} = \Gamma(T/T_{1D})^{-\gamma}$ alak felhasználásán keresztül érthető. C_{\parallel} kifejezéséhez még néhány megjegyzést szükséges fűznünk. $\partial^2 \chi_{1D}^{\text{CDW}} / \partial k^2$ az 1D Fermi-gáz koherenciahossza inverzének második hatványával arányos, nyilvánvaló módon. A koherenciahosszra vonatkozóan nem ismeretes semmiféle, a leg-
alacsonyabb rendű közelítésből leolvasható kifejezésen túlmenő eredmény, ezért mi is ezt használtuk fel. Nevezetesen, az alacsonyrendű vertexkorrekcióban az energia- és impulzusváltozók az $|\omega^2 - v^2 k^2|^{1/2}$ alakban lépnek fel $T=0$ -n. Ha az $i\omega \rightarrow \pi T$ helyettesítést elvégezzük, akkor az 1D szuszceptibilitás ezen „szabály” figyelembevételével

$$\chi_{1D}^{\text{CDW}}(T, k+2k_F) = \Gamma \left(\frac{\pi^2 T^2 + v^2 k^2}{\pi^2 T_{1D}^2} \right)^{-\gamma/2} \simeq \frac{\chi_{1D}(T, 2k_F)}{1 + \frac{\gamma}{2} \xi_{\parallel}^{(0)2} k^2} \quad (\text{II.3.35})$$

$$\xi_{\parallel}^{(0)} = \frac{v}{\pi T}$$

Miután leszámaztattuk a (II.3.17) Ginzburg—Landau-energiában szereplő együtthatókat az 1D Fermi-gáz modellre vonatkozó ismereteink alapján, az 1D korrelációkat a lehető legpontosabban figyelembe véve, térjünk vissza a (II.3.17) alak diszkussziójához. Egy ilyen anizotrop forma a koordinátaváltozók átskalázásával izotrop alakra hozható [59].

$$y_1 = x_{\parallel} / \sqrt{C_{\parallel}}, \quad y_2 = x_{\perp 1} / \sqrt{C_{\perp}}, \quad y_3 = x_{\perp 2} / \sqrt{C_{\perp}} \quad (\text{II.3.36})$$

bevezetésével (II.3.17) így alakítható

$$F[\psi] = \frac{C_{\perp} \sqrt{C_{\parallel}}}{d_{\perp}^2} \int d^3 y [A |\psi|^2 + B |\psi|^4 + |\nabla_y \psi|^2] \quad (\text{II.3.37})$$

$F[\psi]$ ismeretében azután

$$Z = \int \delta \psi e^{-F[\psi]/k_B T} \quad (\text{II.3.38})$$

adja az állapotösszeget és a korrelációs függvényt pedig

$$\langle \psi(y) \psi(y') \rangle = \int \delta \psi e^{-F[\psi]/k_B T} \psi(y) \psi(y') / Z. \quad (\text{II.3.39})$$

Itt $\int \delta \psi$ funkcionál integrálást jelöl. A fenti átalakítás azért előnyös, mert most már ezeket a mennyiségeket az izotrop Ginzburg—Landau-problémára kidolgozott módon lehet számítani. Az izotrop forma persze nem jelenti azt, hogy térfüggő mennyiségek, mint a korrelációs függvény izotrop eloszlást mutatnak, ugyanis mindig vissza kell transzformálni az eredeti x, x' koordinátákra. A funkcionál-integrálás általában nem hajtható végre egzaktul és így különféle egyszerűsítő feltevésekre vagyunk utalva. Itt egyáltalán nem lesz szó ε -sorfejtésről, vagy $1/n$ sorfejtésről [41], hanem arról az egyszerűbb esetről, amikor a fluktuációk perturbációként kezelhetők.

3.3. Fluktuációk perturbációs kezelése és a Ginzburg-kritérium [33]

A (II.3.37) képletben szereplő mennyiségek dimenziói az alábbiak:

$$[A] = \text{erg cm}, \quad [B] = \text{erg cm}^3, \quad [C_{\parallel}] = [C_{\perp}] = \text{erg cm}^3$$

$$[y] = \text{cm} (\text{erg cm}^3)^{-1/2}.$$

Vezessük be y' -t az

$$y' = y(C_{\perp} \sqrt{C_{\parallel}})^{1/3}$$

jelöléssel. y' dimenziója már cm lesz. Ezekután már egyszerűen, dimenzionális megfontolások alapján, tudunk koherenciahosszakat definiálni. $F[\psi]y'$ -vel így fest:

$$F[\psi] = d_{\perp}^{-2} \int d^3 y' [A|\psi|^2 + B|\psi|^4 + |\nabla_y \psi|^2 \cdot (C_{\perp} \sqrt{C_{\parallel}})^{2/3}]. \quad (\text{II.3.40})$$

A szokásosan bevezetett Ginzburg—Landau és fáziskoherenciahosszak megfelelői a jelen esetben:

$$\xi_{\text{GL}} = A^{-1/2} (C_{\perp} \sqrt{C_{\parallel}})^{1/3}, \quad (\text{II.3.41})$$

$$\xi_{\text{ph}} = d_{\perp}^2 TB (C_{\perp} \sqrt{C_{\parallel}})^{-2/3} A^{-1} \quad (\text{II.3.42})$$

ξ_{GL} a kvadratikusan tagok együtthatóiból épül fel, és így a negyedrendű tag elhanyagolásával kapható harmonikus, vagy Gauss-i problémát jellemzi. Nyilvánvaló, hogy T_c -hez közel a Gauss-i fluktuációk figyelembevétele már nem elegendő, és a negyedrendű tag is számottevővé kezd válni. Erre jellemző ξ_{ph} , mely B -vel arányos. A két koherenciahossz egyenlősége jellemzi a Ginzburg-kritikus hőmérsékletet [60, 61]

$$\xi_{\text{ph}} = \xi_{\text{GL}}|_{T=T_G} \quad (\text{II.3.43})$$

T_G -nek T_c -től való távolsága, $(T_G - T_c)/T_c \equiv t_G$ jellemzi a kritikus tartomány nagyságát. $T \gg T_G$: fluktuációk elhanyagolhatók, a Landau-, vagy átlagtérelmélet érvényes. t_G -n belül a fluktuációk erősek.

Továbbá, a $\xi_{\text{ph}}/\xi_{\text{GL}}$ hányados szerepel, mint kis paraméter a különféle termodinamikai mennyiségek Ginzburg—Landau fluktuációinak perturbációs elméletében. Ennek lényege, hogy a Gauss-i forma a perturbálatlan energia és a negyedrendű tag szerepel perturbációként.

Ha tehát Q valamilyen termodinamikai mennyiséget jelöl, akkor

$$Q = Q_0 + Q_{fl} \left(1 + q \frac{\xi_{\text{ph}}}{\xi_{\text{GL}}} + \dots \right) \quad (\text{II.3.44})$$

adódik. Itt Q_0 Q értéke, ha a fluktuációktól eltekintünk és Q_{fl} a fluktuációk értéke távol a kritikus tartománytól. Valamely konkrét esetben t_G megállapítása nem könnyű feladat, hiszen Q_0 és Q_{fl} ismerete nélkül t_G nem azonosítható. Q -ra a fajhő szolgáltatja a legegyszerűbb példát, ennek diszkussziójára rövidesen rátérünk.

A (II.3.43) feltétel a (II.3.41) és (II.3.42)-ből kapható

$$\frac{\xi_{\text{ph}}}{\xi_{\text{GL}}} = \frac{\sqrt{2}\gamma^{3/2}}{s^2} \frac{(g_1^{\perp} \chi_{1D}^{\text{CDW}})^2}{(1 - g_1^{\perp} \chi_{1D}^{\text{CDW}})^{1/2}} \quad (\text{II.3.45})$$

összefüggéssel így fest

$$1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} = \frac{2\gamma^3}{s^4} (g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}})^4, \quad (\text{II.3.46})$$

ahol $s \equiv R_{\text{eff}}/d_\perp$ a láncok közötti kölcsönhatás hatótávolságának dimenziótlan mértéke.

Ha $t_G \ll 1$, akkor (II.3.46)-ban $1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} \simeq \gamma t$ írható és t -ben lineáris tagokig

$$t_G \simeq 2\gamma^2/s^4. \quad (\text{II.3.47})$$

(II.3.47) mutatja, hogy hosszú hatótávolságú kölcsönhatás esetén (nagy s) t_G kicsi, azaz a Landau-elmélet széles hőmérséklet-intervallumban érvényes — ez egy olyan eredmény, amit vártunk is.

Általános esetre a $g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} = (T/T_{\text{MF}})^{-\gamma}$ összefüggést felhasználva a (II.3.46) egyenlet numerikusan megoldható. Az eredmény különböző γ és s értékekre a 23. ábrán látható.

Definiáljuk most a Ginzburg—Landau-elmélet keretén belül is az $1D \rightarrow 3D$ „crossover” hőmérsékletet. Erre többféle lehetőség is kínálkozik. Mind a láncirányú, mind a transzverzális koherenciahosszak $(1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}})^{-1/2}$ faktorról erősödnek fel T_{MF} -hez közeledve:

$$\xi_\parallel^2 = \frac{1}{2} \gamma \xi_\parallel^{(0)2} (1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}})^{-1}, \quad \xi_\pi^{(0)} = \frac{v}{\pi T}, \quad (\text{II.3.48})$$

$$\xi_\perp^2 = \frac{1}{2} d_\perp^2 s^2 g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} (1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}})^{-1}. \quad (\text{II.3.49})$$

ξ_\perp magas hőmérsékleteken, ahol $g_1^\perp \chi_{1D} \gg 1$, elenyészően kicsi. Crossover hőmérsékletnek tekinthető így az a hőmérséklet, amelyen ξ_\perp eléri a d_\perp értéket (Dietrich [62])

$$\xi_\perp = d_\perp |_{T=T_{\text{cro}}}. \quad (\text{II.3.50})$$

Legközelebbi szomszéd-kölcsönhatás esetén, amikor is $s = 1/\sqrt{2}$ (négyzetrácsot tételezünk fel)

$$t_{\text{cro}} = (1,25)^{1/\gamma} - 1 \quad (\text{II.3.51})$$

adódik, (II.3.49) és (II.3.50) összevetéséből. A 23. ábrán a (II.3.51) összefüggést is ábrázoltuk.

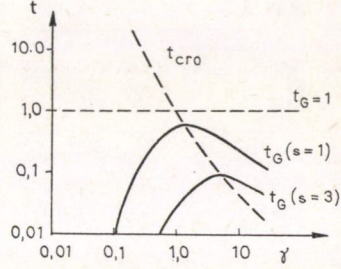
A Landau-elmélet érvényességének feltételeként

$$t_G \ll 1 \quad (\text{II.3.52})$$

mellett

$$t_G < t_{\text{cro}} \quad (\text{II.3.53})$$

is előírandó [33], ugyanis $T > T_{\text{cro}}$ esetén a rendszer lényegében egydimenziós és a Landau-elméletnek a vázolt háromdimenziós formájában sehol sincsen értelme a rendszer leírása szempontjából, ha $T_G > T_{\text{cro}}$, azaz az egész $3D$ tartomány a kritikus tartományon belül esik. Az ábrán is jól látható, hogy a $t_G < t_{\text{cro}}$ feltétel csak



23. ábra

kis s -eknél jelent megszorítást, így az általában az 1D vezetőknél feltételezett legközelebbi szomszéd kölcsönhatás esetében a $\gamma \simeq 1$ eset már a $t_G \simeq t_{cro}$ határnál van. Egyébként a kísérleti adatok elemzésénél majd látni fogjuk, hogy a valóságban — úgy néz ki — a most említett határeset közelében vagyunk.

Mindenesetre nagyon szem előtt kell tartanunk azt a tényt, hogy mind t_G , mind t_{cro} definíciója nagymértékben önkényes és így minden idevonatkozó tapasztalati ténnyel való összehasonlítás csak szemi-quantitatívnak tekinthető, amelyen egy nagyságrendileg megfelelő egyezést értek. Továbbá, t_G (II.3.41)–(II.3.43)-on keresztül $C_{||}$ révén erősen függ $\xi_{||}^{(0)}$ -tól is, azaz az 1D rendszer koherenciahosszától. Erre mi a perturbátlan kifejezést használtuk fel — jobb híján — melynek hőmérsékletfüggése T^{-1} -gyel megy. A tapasztalat szerint ez a függés erősebb, és ez a tény t_G -t kisebb értékek felé tolja el.

3.4. A fajhő. t_{cro} és t_G kísérleti értékekkel való összevetése [33, 27]

Az átlagtérelméletben a kritikus pontban a fajhő ugrást szenved; az ugrás nagysága

$$C = -T_c \left. \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right|_{T_c}. \quad (\text{II.3.54})$$

ahol F_0 az egyensúlyi szabadenergia, mely az A és B együtthatókkal fejezhető ki a jól ismert módon. A -ra és B -re a t -ben vezető rendig számolt $A \simeq |g_{\perp}^{\perp}| \gamma t$; $B \simeq (g_{\perp}^{\perp})^2 \gamma^2 \xi_{||}^{(0)} / 2$ alakot használva

$$\Delta C = \frac{4}{\xi^{(0)}(T_{MF})}. \quad (\text{II.3.55})$$

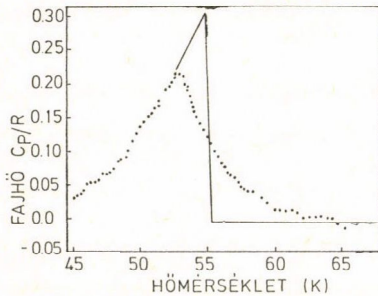
A fajhőugráshoz az első fluktuációs járulékot először Thouless [63] számolta 1960-ban a szupravezetés kapcsán. Az itt használt alakban Ferrel származtatta [58]:

$$C_{fl} = \frac{\Delta C}{8\pi} \frac{\xi_{ph}}{\xi_{GL}} \quad (\text{II.3.56})$$

tehát

$$\frac{C_{fl}}{\Delta C} \simeq 0,04 \frac{\xi_{ph}}{\xi_{GL}} \quad (\text{II.3.57})$$

(II.3.44)-hez visszatérve, $Q_0 = \Delta C$ és $Q_{fl}, q = \Delta C / 8\pi$. A TTF—TCNQ esetében



24. ábra

a 24. ábrán bemutatott kísérleti adatok ismeretek (Craven et al. [4]), melyeket egy sima, 60 K felettről extrapolált háttér levonása után nyertek a kísérletezők. A berajzolt összefüggő, ugrást mutató vonal az átmenet MF karakterét közelíti.

$T = T_G$ -nál $\xi_{ph} / \xi_{GL} = 1$; így (II.3.57)-ből T_G -nél $C_{fl} / \Delta C \simeq 0,04$. A 24. ábrából hozzávetőleg 60–65 K-nél áll be a $C_{fl} / \Delta C \simeq 0,04$ helyzet, ezt tekinthetjük Ginzburg-hőmérsékletnek. C_{fl} -t a kísérleti görbére illeszteni illuzórikus lenne, hiszen a háttérfajhő, melyet a kísérletezők levon-

tak bizonytalan, valamint a görbe lekerekedésének, szennyezések stb. miatti interpretálása az elméletből hiányzik és így legfőbb csak az emelkedés kezdeti szakasz jöhetne szóba.

Az elméletben szereplő karakterisztikus hőmérsékletek diszkusszióját kezdjük néhány, T_{MF} -et illető megjegyzéssel. T_{MF} kifejezése (II.2.24)-ben van megadva (természetesen az általánosított Landau-elméletben is ugyanez a formula érvényes). Az itt szereplő Γ értéke (II.2.21) általában függ a g_1, g_2 csatolási állandóktól és sem a Luther—Emery-féle egzakt megoldásból, sem a renormálási csoport számolásból megbízható kifejezés nem nyerhető rá. (II.2.21)-en keresztül T_{MF} γ -ra még érzékenyebb, mint Γ értékére. A számolások folyamán mi a $\gamma \lesssim 1$ feltevessel élünk és γ értékére T_{MF} -hez hasonlóan érzékeny mennyiséget nem is kívánunk az elméletből megjósolni. Egyébként T_{MF} az egyetlen mennyiségünk, amelyben Γ szerepel, mindenütt máshol a Γ függés csak T_{MF} -en keresztül jelentkezik, melyet a tapasztalati értékkel egyenlőnek fogunk választani. Ha mégis közelítőleg visszafelé akarnánk számolni, akkor az ésszerű

$$|g_1^{\pm}/\pi v| \simeq 0,05, \quad \gamma \lesssim 1, \quad T_{MF}/T_{1D} \simeq 0,1$$

adatokkal, illetve értékekkel

$$\Gamma \simeq 2/\pi v$$

adódik. g_1^{\pm} becslését Lee *et al.* [64] végezték, Coulomb-kölcsönhatást tételezve fel.

Térjünk rá ezután T_G és T_{cro} diszkussziójára. Legközelebbi szomszéd kölcsönhatást feltételezve az egyes láncok között, különböző γ értékekhez tartozó t_G és t_{cro} , valamint ezek kísérleti értéke látható a II. táblázatban.

II. TÁBLÁZAT

γ	0,1	0,3	0,5	1	Exp.
t_G	0,1	0,6	0,9	1	0,1—0,2
t_{cro}	8	1,1	0,6	0,3	0,12—0,15

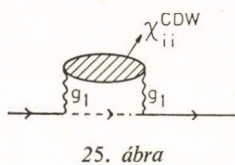
Röntgen diffúz szórási vizsgálatok TTF—TCNQ-nál [65] szolgáltatnak T_{cro} -ra adatot: $T \simeq 60$ K környezetében a szórási kép megváltozik és a tranzverzális irányú rend kialakulását jelző röntgen „pattern” kezd láthatóvá válni. A II. táblázatból kitűnik, hogy T_G és T_{cro} igen közel állnak egymáshoz, amint erre már utaltunk. T_{cro} elméleti értéke nem sok tényezőtől függ, bár azért T_{cro} definíciója sem egyértelmű. T_G már több bizonytalanságot tartalmaz. Magának az elméletnek a közelítésein túlmenően pl. $\xi_{||}^{(0)}$ értékét, mint már említettük, T^{-1} -gyel arányosnak vettük. Azonban a kísérleti T -függés a párhuzamos koherenciahosszat illetően ennél okvetlenül szingulárisabb, mint ez a most idézett kísérleti cikkből ugyancsak kiderül. Khanna *et al.* [64] nem ad meg exponenst, ha azonban durván megpróbáljuk a koherenciahossz hatványfüggvényhez való illesztését $T^{-\nu}$ alakban, akkor ν 2-nél is nagyobb adódik. Ezzel értékelve ki (II.3.43)-at a Ginzburg-tartomány lényegesen csökken. Éppen ezért azután a $\gamma \lesssim 1$ feltételezés tűnik a legésszerűbbnek:

ez adja t_{cro} -t a kísérleti értékéhez legközelebb, míg t_G , felbecsültségét is figyelembe véve, szintén rendben levőnek látszik. Mindez kiegészítendő a már szintén említett körülménnyel, hogy csak szemi-kvantitatív, azaz nagyságrendileg helyes leírásra ésszerű törekednünk.

3.5. Az állapotsűrűség [34]

Az elektronok állapotsűrűségét kvázi-1D anyagokban számos szerző vizsgálta elméletileg [28, 7, 66]. Mindezen dolgozatokban kiindulásul fononokhoz csatolt szabad elektron gáz modell szolgált. A szerzők megmutatták, hogy az elektron állapotsűrűségben a fluktuációk számottevő álhézag („pseudogap”) fellépését eredményezik $T > T_c$ -re. Rice és Strässler a láncok közötti kölcsönhatásról is számot adtak a leírásban azáltal, hogy a fonondiszperzió tranzverzális komponensét zérustól különböztetnek tételezték fel. Mindezek a számolások azt sugallták, hogy egészen szobahőmérsékletig terjedően tetemes nagyságú álhézag van az elektronok energiaspektrumában, mely 1D fluktuációs eredetű. Ennek alapján interpretálta Tanner *et al.* [67] a frekvenciafüggő vezetőképesség mérések adataiban szobahőmérsékleten talált anomáliát (dip-et) oly módon, hogy az az 1D CDW fluktuációk okozta pseudogap következménye.

Ebben a pontban megmutatjuk, hogy a pseudogapet a láncok közötti kölcsönhatással kiegészített BGD modell keretei között kiszámítva, az idézett eredményekkel ellentétben, az csak egy T_c körüli kis tartományban adódik észlelhetőnek. A jelen tárgyalás a fononokat nem veszi explicite figyelembe. A fluktuációs propagátor szerepét a χ_{3D}^{CDW} válaszfüggvény fogja játszani. A számolás menetét illetően Rice és Strässler [7] munkáját követjük.



25. ábra

Az általánosított Ginzburg—Landau-képünk szellemében a helyes eljárás az lenne, hogy a 3D fluktuációk miatti sajátenergia korrekciót számítanánk ki az egzakt 1D egyrészecskés Green-függvényhez. Ez nem keresztülvihető, ezért csak az 1D korrelációk egy — remélhetőleg legfontosabb — részét vesszük figyelembe. A közelítés korlátait később diszkutáljuk.

Ami a 3D fluktuációkat illeti, a közelítésünk a sajátenergiához az elsőrendű fluktuációs járulékot veszi figyelembe; ez látható a 25. ábrán.

Itt a hurok az i -k lánc CDW propagátorát

$$\chi_{ii}^{\text{CDW}}(q_{\parallel}, \omega'_n) = \int_0^1 d\varrho_{\perp}^2 \cdot \chi_{3D}^{\text{CDW}}(\varrho_{\perp}, q_{\parallel}, \omega'_n) \quad (\text{II.3.58})$$

-t jelzi. (II.3.58)-ban $\varrho_{\perp} = q_{\perp} d_{\perp} / 2\sqrt{\pi}$ az elektronok dimenziótlan tranzverzális impulzusa. T_c közelében a legfontosabb járulékot az $\omega'_n = 0$ tag adja a frekvenciákra való összegben. (A dinamika hatását az elektron állapotsűrűségre az elektron fonon modell keretében Bjelis és Barisic vizsgálta [68].) Ezt a tagot megtartva és χ_{3D}^{CDW} -re a (II.3.30)—(II.3.33) alapján kapható

$$\chi_{3D}^{\text{CDW}}(\varrho_{\perp}, q_{\parallel}, \omega'_n = 0) = \chi_{1D}^{\text{CDW}}(T) [1 - g_1 \chi_{1D}^{\text{CDW}} + \frac{1}{2} \gamma \zeta_{\parallel}^{(0)2} q_{\parallel}^2 + g_1^{\perp} \chi_{1D}^{\text{CDW}} 2\pi s^2 \varrho_{\perp}^2]^{-1} \quad (\text{II.3.59})$$

kifejezést (II.3.58)-ba helyettesítve a $\sum(\varepsilon, \omega_n)$ elektron sajátenergia a 25. ábra gráfjának megfelelően kiszámítható. Az eredmény

$$\sum(\varepsilon, \omega_n) = \frac{g_1^2 T}{iv|g_1^\perp|2\pi s^2} \ln \left(1 + \frac{iv}{\xi_\parallel} \frac{\left[1 + \frac{g_1^\perp \chi_{1D} 2\pi s^2}{(1 - g_1^\perp \chi_{1D})^{1/2}} \right]^{1/2} - 1}{i\omega_n + \varepsilon + iv\xi_\parallel^{-1}} \right) \quad (II.3.60)$$

$\varepsilon = v(k_\parallel - k_F)$

\sum ismeretében azután $N(\omega)$, az elektron állapotsűrűsége, az

$$\frac{N(\omega)}{N_0} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\varepsilon \frac{1}{\omega - \varepsilon - \sum(\varepsilon, \omega)} \quad (II.3.61)$$

képlet alapján kapható. Erre vonatkozólag Rice és Strässler [7] eredményét használtuk fel az ott található paraméterek megfelelő átírásával: $c \rightarrow g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} 2\pi s^2$, $\Omega_0^2/\omega_0^2 \rightarrow 1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}}$, $\xi^2 \rightarrow \xi_\parallel^2$, $\bar{g}^2 a \rightarrow g_1^2 \chi_{1D}^{\text{CDW}}$. Pszeudogap általában fellép az állapotsűrűségben, $T > T_c$ -re, de ez csak akkor éles és kivehető, ha a sajátenergia imaginárius része kicsi és a valós része a $(i\omega_n \rightarrow \omega)$

$$\text{Re} \sum \simeq \frac{\tilde{\Psi}^2}{\omega + \varepsilon} \quad (II.3.62)$$

alakban áll elő. Mikor teljesülhetnek ezek a feltételek a jelen, konkrét esetben? Azt kapjuk, hogy akkor, hogy ha az

$$1) \quad \alpha \equiv \frac{v}{\xi_\parallel \tilde{\Psi}} \ll 1 \quad (II.3.63)$$

és

$$2) \quad f \equiv \frac{v}{\xi_\parallel \tilde{\Psi}} \left[\left(1 + \frac{g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}} 2\pi s^2}{1 - g_1^\perp \chi_{1D}^{\text{CDW}}} \right)^{1/2} - 1 \right] \ll 1 \quad (II.3.64)$$

egyenlőtlenségek kielégülhetnek. Itt a

$$\tilde{\Psi}^2 \equiv 2,2 \frac{g_1^2}{\pi v |g_1^\perp| \gamma^{1/2} s^2} (1 - g_1^\perp \chi_{1D})^{1/2} \left[\left(1 + \frac{g_1^\perp \chi_{1D} 2\pi s^2}{1 - g_1^\perp \chi_{1D}} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (II.3.65)$$

jelölést használtuk. T_c -hez közel a t -ben linearizált alakokkal:

$$1) \quad 1 \gg \alpha = \left(3,5 \frac{\pi v |g_1^\perp| s \gamma^{1/2}}{g_1^2} t \right)^{1/2} \simeq 0,5 t^{1/2}, \quad (II.3.63a)$$

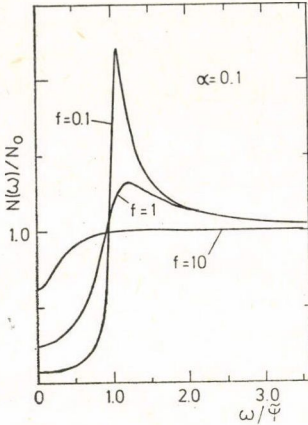
$$2) \quad 1 \gg f = \left(21,7 \frac{\pi v |g_1^\perp| s^3}{g_1^2 \gamma^{1/2}} \right)^{1/2} \simeq 0,9. \quad (II.3.64a)$$

Ebből látszik, hogy ha t kicsi, akkor 1) jól teljesülhet, viszont 2) nem. Mindazonáltal, $\alpha \ll 1$ -re még valami elkenődött gap azért látható lehet T_c körül. Mekkora ez a tartomány? Nagyságrendi becslés céljából idézzük Rice és Strässler eredményét: Az ő ábrájukon (26. ábra) $f=1$ -nél és $\alpha=0,1$ -nél a pszeudogap elmosódása jelentőssé kezd válni. Nálunk ez a helyzet a (II.3.63) egyenletből $t \gtrsim 0,04$ esetén áll elő,

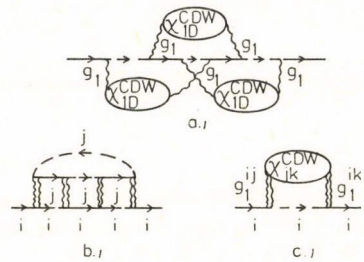
azaz ilyen keskeny hőmérséklettartományra terjed csak ki a pszeudogap. Ez a tartomány a t_G -val jellemzett fluktuációs tartományon belül esik.

Megjegyezzük, hogy (II.3.63) és (II.3.64) numerikus kiértékelésénél a következő paraméterértékeket használtuk: $s=1/\sqrt{2}$ $\gamma \approx 1$, $|g_1/2\pi v| \approx 0,5$, $|g_1^\perp/\pi v| \approx 0,05$.

Végezetül vizsgáljuk meg a számításban alkalmazott közelítés korlátait. A 27. ábra mutat néhány diagram-típust, melyeket nem vettünk figyelembe Σ számolásánál.



26. ábra



27. ábra

A $g_1^\perp=0$ esetben a jelen közelítés azt implikálja, hogy csak CDW fluktuációs járulékokat és azokat is csak a CDW propagátorban elsőrendig vettük figyelembe. A 27.a) ábra a fluktuációs propagátorban harmadrendű. Ilyen, és minden magasabbrendű fluktuációs propagátor diagram a harmadrendű renormálási csoport közelítésben jön először számításba. Mivel a másodrendű renormálási csoport közelítés az 1D probléma lényeges vonásait már tükrözi, az a) típusú gráfok elhanyagolása valószínűleg nem problematikus. A 27.b) és c) típusú diagramokban a fluktuációs propagátor g_1^{ij} -n keresztül csatolódik, ezek a $|g_1|, |g_2| \gg |g_1^{ij}|, |g_2^{ij}|$ anizotrópia feltétel miatt hanyagolandók el. További diszkusszió céljából az eredeti dolgozatunkra [34] utalunk.

III. SZENNYEZÉSEK HATÁSA 1D ÉS KVÁZI-1D VEZETŐ RENDSZEREKRE

1. Tapasztalati tények TTF—TCNQ-ra a magashőmérsékleti fázisban és az 53 K-es fázisátalakulás környezetében

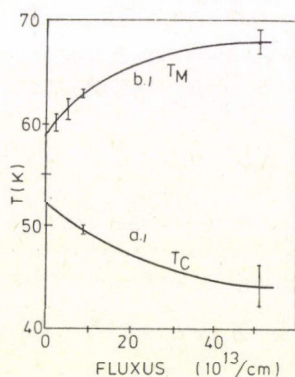
A kváziegydimenziós szerves vezetők közül a TTF—TCNQ a legtöbbet vizsgált anyag. Legújabb besugárzás hatására kialakuló rendezetlenségek hatásának vizsgálatát közölték Heeger és munkatársai [25, 26]. Besugárzással a hibákat kontrollált módon lehet létrehozni, és így a szennyezéskonzentráció folytonosan vál-

toztatható. Az ún. tiszta minta sem defektmentes, hanem tipikusan $c_0 \approx 100$ ppm (0,01%) koncentrációban tartalmaz hibákat, illetve szennyezőket. A besugárzott TTF—TCNQ mintáknak sok tulajdonságát vizsgálták, mi ezek közül csak azokat említjük, melyek az elmélet keretei között interpretálásra kerülnek.

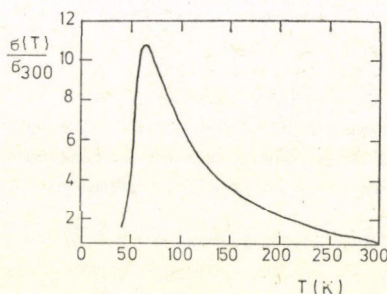
1. Mérték a TTF—TCNQ legelső ($T_c = 53$ K) fázisátmenetének kritikus hőmérsékletét a koncentráció függvényében (28. ábra a) görbe). A gradiens értéke c_0 -nál

$$\left. \frac{dT_c}{dc} \right|_{c_0} = -150 \text{ K/\%}. \quad (\text{III.1.1})$$

2. Az egyenáramú vezetőképesség igen érdekes hőmérséklet- és koncentrációfüggést mutat. Az előző, mely a témakör felfutása óta jól ismert (29. ábra) jellegzetes maximumot mutat egy T_c -től nem túlságosan távoleső T_M hőmérsékleten.



28. ábra



29. ábra

A kísérletezők részletesen vizsgálták e maximumhely környékének viselkedését a koncentráció függvényében, és azt találták, hogy c növekedésével a maximum ellaposodik, a vezetőképesség csökken és maga T_M pedig növekszik (28. ábra b) görbe). T_M deriváltja a koncentráció szerint c_0 -nál véve

$$\left. \frac{dT_M}{dc} \right|_{c_0} = 500 \text{ K/\%} \quad (\text{III.1.2})$$

T_M és T_c ellentétes irányú változásának elméleti magyarázata eléggé problematikusnak látszott. A kísérletezők szerint kvalitatív magyarázat adható az egyrészeske hullámfüggvények szennyezések okozta 1D lokalizációján alapuló elméletből, ugyanakkor szerintük a lokalizációs képet a nagyfrekvenciás adatok nem támasztják alá.

A 29. ábra ellenállásgörbéjét, annak koncentrációfüggésével együtt, a $T \gg T_c$ hőmérsékleti tartományban,

$$\varrho(T) = \alpha c + \varrho_1 (T/T_0)^2 \quad (\text{III.1.3})$$

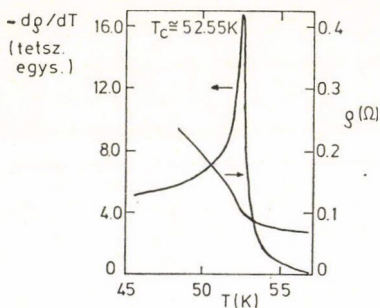
alakkal illesztették közelítőleg [25]. A (III.1.3)-ban szereplő paraméterek kísérleti értékei:

$$\alpha = 5 \cdot 10^{-3} (\Omega \text{cm})/\%; \quad \lambda = 2, 3; \quad \varrho_1 T_0^{-\lambda} = (1-2) \cdot 10^{-8} \Omega \text{cm}/(\text{K})^{2,3} \quad (\text{III.1.4})$$

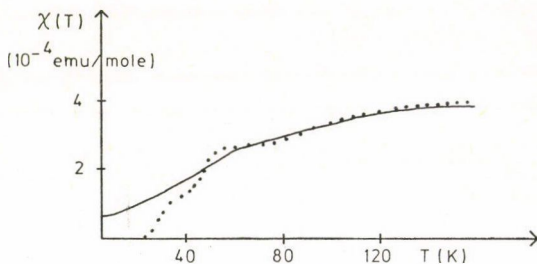
A második tag sem egészen független c -től, ezzel az anomáliával azonban itt mi nem foglalkozunk. A $T^{2,3}$ -os hőmérsékletfüggés vezetőktől szokatlan és ennek magyarázatára kielégítő elmélet mindmáig nem született. Sokféle fizikai forrásból [69] jöhet $\varrho \sim T$, néhányan, a lokalizációs kép [46] és egyéb megfontolások [70] alapján $\varrho \sim T^2$ -et jósoltak, mások rámutatnak arra, hogy a kísérleteknél a hőkitágulást figyelembe véve a hatványkitevő nő és a lineáris T -hatvány négyzetessé módosulhat [71]. A megfigyelt hatványkitevő azonban határozottan nagyobb 2-nél, a lokalizációs képet pedig, mint már említettük, egyéb tények interpretációi teszik kétségesse. A továbbiakban mi elfogadjuk a (III.1.3) fenomenologikus kifejezést az ellenállás ezen (magashőmérsékleti) részét illetően és nem próbáljuk valamely elmélet jóslataihoz illeszteni az adatokat.

A maximum kiértékeléséhez a csökkenő T -vel növekvő magashőmérsékleti vezetőképesség-tagot egy másik, ellentétes viselkedést mutató, T_c közelében dominálni kezdő tagnak kell lerontania. Ennek létezése még jobban szembetűnő a 30. ábrán, mely a $d\varrho/dT$ deriváltat mutatja be az 53 K-es átalakulás közvetlen közelében. [72].

Erre, az ún. fluktuációs tagra vonatkozóan egy sor számolást végeztek, a legkülönbözőbb közelítésben [73]–[78]. *Lee et al.* [28] javasolta először, hogy a csökkenés (σ -ban) a szennyezéseken való pinning miatt áll elő. Ennek szellemében *Fukuyama, Rice és Varma* [73] elektron-fonon kölcsönhatásos modellből kiindulva megmutatták, hogy a pinningnek a magashőmérsékleti ($T > T_c$) fázisban megfelelő fluktuációs járulékok valóban csökkentik a vezetőképességet $\varrho_{fl} \sim ct^{-1/2}$, T_c közvetlen közelében.



30. ábra



31. ábra

3. Mágneses szuszceptibilitás *Gunning et al.* [26] mérései szerint TTF—TCNQ-ban a sztatikus mágneses szuszceptibilitás $T > 60$ K esetén csaknem teljesen érzéketlen a szennyezésekre, míg alacsonyabb hőmérsékleteken lényeges függés tapasztalható. (A 31. ábrán az összefüggő vonallal kihúzott görbe a besugárzásmentes, a pontokkal rajzolt pedig az erősen szennyezett minta szuszceptibilitását mutatja.) Természetesen, a fázisátmenetek szintén jelentkeznek a szuszceptibilitásban, az erős függés a legelső fázisátalakulásnál kezdődik.

2. Az általánosított Ginzburg—Landau-elmélet paraméterei szennyezések jelenlétében

Elsősorban a szennyezéseknek az 1D rendszerre gyakorolt befolyását vizsgáljuk és a 3D rendszerre kifejtett effektust az 1D rendszer jellemzőinek befolyásán keresztül próbáljuk megérteni. Ezt indokolja az a körülmény, hogy a szennyezések hatása 1D-ban rendkívül jelentős, mind az egyrészecskés [79, 80], mind a kollektív állapotok szempontjából. Jól ismeretes [81], hogy a nem-mágneses szennyezések hatása a Peierls-állapotra épp oly drasztikus, mint a mágneses szennyezéseké a 3D szupravezető állapotra. S minthogy a Peierls-állapot a kvázi-1D rendszerek legjellemzőbb sajátossága, a szennyezéseknek erre való befolyása a leglényegesebb tényező az elméletben.

Az elektronoknak és a szennyezéseknek a kölcsönhatását leíró Hamilton-operátort a

$$H_{e-\text{imp}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{ix} \sum_{q\sigma k} U_q e^{iqR_x} a_{k+i\sigma}^+ a_{k+q+i\sigma} \quad (\text{III.2.1})$$

alakban vesszük fel [82]. A nem-mágneses, az R_x -val jelölt helyeken véletlenszerűen elhelyezkedő szennyező atomok az elektronok számára egy U_q szóró-potenciált jelentenek. A szennyező atomok R_x pozícióira átlagolnunk kell. A Fermi-nívó közelében elhelyezkedő elektronok számára az 1D esetben ismét csak két szórási folyamat dominál 1. előreszórás $q \simeq 0$ és 2. visszaszórás $q \simeq 2k_F$. A megfelelő potenciál-komponensekről az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy egyenlő nagyságúak $U_0 \simeq U_{2k_F} \equiv U$.

Az elektronoknak a szennyezésen való szóródását Born közelítésben vesszük figyelembe. Ennek eredményeként az elektronállapotok véges τ_0 élettartamra tesznek szert [83]; $1/\tau_0$ az előreszórási és visszaszórási tagok összegeként áll elő

$$\frac{1}{\tau_0} = c \left(\frac{U_0^2}{v} + \frac{U_{2k_F}^2}{v} \right) = c \frac{2U^2}{v}. \quad (\text{III.2.2})$$

Formálisan, τ_0 fellepte módosítja az elektron Green-függvényét G_0 -t, amellyel az I. fejezetben a perturbációszámítás során a gráfokat kiszámítottuk, és így nyilvánvalóan megváltozik az elemi buborékok járuléka is. Nem-mágneses szennyezésekről lévén szó, a Cooper-buborék (l. a 11.a) ábrát) nem módosul. A 11.b) ábrán látható $2k_F$ -es elektron-lyuk buborékot Patton és Sham [78] számolták a következő eredménnyel:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi v} \left[\ln \frac{T}{\omega_D} - \Psi \left(\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau_0 T} (2 - i\tau_0(|\omega_n| + vp)) \right) \right] + \\ + \frac{1}{2} \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau_0 T} (2 - i\tau_0(|\omega_n| - vp)) \right) \Bigg], \quad (\text{III.2.3}) \end{aligned}$$

ahol $\omega_n = n\pi T$ (n = egész) és Ψ a diamma függvény. Ez a CDW válaszfüggvény nullarendű járuléka.

Mi történik magasabb közelítésekben? Parkettaközelítésben, vagy a neki megfelelő renormálási csoport közelítésben megmutatható, hogy az invariáns csatolások

g'_1, g'_2 nem függnék a szennyezéstől, legalábbis kis koncentrációknál. Itt tekintettel kell lenni arra a körülményre is, hogy nem mindegy a szennyezésekre való átlagolás és a gráfok felösszegezésének a sorrendje. Ez főként a Cooper csatornába beépülő Peierls-típusú betétrekszekenél érdekes.

Az I. fejezetbeli 5. ábra gráfjainak járulékaként, a fent mondottak alapján most azt kapjuk, hogy

$$\text{Cooper csatorna: } \frac{1}{2\pi v} \ln x [2g_1 g_2 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - (g_1^2 + g_2^2) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}] \quad (\text{III.2.4})$$

$$\text{Peierls csatorna: } \frac{1}{2\pi v} (\ln x + a) [(2g_1^2 - 2g_1 g_2) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + g_2^2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}], \quad (\text{III.2.5})$$

$$\text{ahol } a \equiv -\Psi\left(\frac{1}{2}\right) + \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T}\right). \quad (\text{III.2.6})$$

Vegyük azonban észre, hogy a változása $\frac{1}{2\pi\tau_0 T} \Psi'\left(\frac{1}{2}\right) \ll 1$ (kis c esete) és $\ln \frac{1}{2\pi\tau_0 T}$ között történik; $(2\pi\tau_0)^{-1} \simeq T$ -nél $a \simeq 2$, azaz effektíve $0 < a < O(1)$. Éppen ezért elég kicsi c -re $|g^2 a| \ll |g^2 \ln x|$, $|g|$ és így (III.2.5)-ben a elhanyagolható, azaz g' nem módosul az $1/\tau_0 = 0$ esethez képest. A $g_1 > 0$ esetben a (III.2.4), (III.2.5)-tel számolt Lie-egyenlet elég jó közelítést szolgáltat; a $g_1 < 0$ esetben viszont a parkettaközelítés nem kielégítő. Az infinitezimális generátorban a következő rendben fellépő új gráfok feltehetően sokkal gyengébb koncentrációfüggést mutatnak, mint az elemi buborék: a sajátenergiás gráfokat illetően *Zawadowski* idevágó eredményére tudunk hivatkozni [84] eltekintve attól, hogy nála $U_{2k_F} = 0$ volt véve. Mindezek alapján feltételezzük, hogy g'_1, g'_2 nem sokat változik,

$$g'_2 = \frac{1}{2} g'_1 + g_2 - \frac{1}{2} g_1$$

is érvényben marad és $x \rightarrow 0$ -ra a 9. ábrán bemutatott viselkedés jellemzi az invariáns csatolásokat.

Ezután már megvizsgálhatjuk χ_{1D}^{CDW} kérdését. Legyen $g_1 > 0$, mely, úgy mint az I. fejezetben, most is a tisztább eset. Maradjunk továbbra is a renormálási csoport módszerén belül. χ_{1D}^{CDW} helyett, mint az I.4. pontban tárgyaltuk, $\bar{\chi}_{1D}^{\text{CDW}}$ -t lehet Lie-egyenletből kiszámítani

$$\frac{\partial \ln \bar{\chi}_{1D}^{\text{CDW}}}{\partial \xi} = \frac{1}{\pi v} (2g'_1 - g'_2 + O(g'^2)). \quad (\text{III.2.8})$$

Itt az első két tag a 32. ábrán bemutatott két gráfból jön, ezek járuléka egyszerű (III.2.3) buborék-járulékok szorzata. Így tehát (III.2.8)-ban $\xi = \ln x + a = \ln(xe^a)$.



32. ábra

A $g'_1 \rightarrow 0$, $g'_2 \rightarrow g_2 - \frac{1}{2} g_1$ ($x \rightarrow 0$) határesetben tehát $2g'_1 - g'_2 = -g_2 + \frac{1}{2} g_1 = \text{konst.}$ és így a differenciálegyenlet-eszközölte gráf felösszegezés sem hoz be mást, mint Peierls buborékot. (III.2.8)-ból a

$$\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T) = \Gamma \left(\frac{T e^a}{T_{\text{ID}}} \right)^{-\gamma} = \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(T) e^{-\gamma a} \quad (\text{III.2.9})$$

alak következik; itt $\gamma \simeq 2g_2 - g_1$, de mi feltételezzük, hogy (III.2.9) általánosabb γ -ra is közelítőleg érvényes marad.

(III.2.9) szerint $\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}$ viselkedése a következő. Ha c -t növeljük, csökkennek a CDW fluktuációk és amikor c akkora, hogy az

$$\frac{1}{\tau_0} \simeq 2\pi T$$

értéket eléri, akkor a fluktuációk „befagynak”, $\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}$ konstans marad.

Érdemes megjegyezni, hogy korábbi vizsgálatok, bár más közelítésben (szennyezések félklasszikus kezelése) és csak előreszórásra szorítkozva ($U_{2k_F} \simeq 0$), hasonló eredményt adtak [84, 85]. Nevezetesen, parkettaközelítésben és azt a tényt kiaknázva, hogy kváziklasszikus közelítésben a G_0 Green-függvény koordináta reprezentációbeli alakja $\exp \left[\mp \frac{i}{v} \int_{x_1}^{x_2} U(x) dx \right]$ -vel szorozódik, meg lehetett mutatni, hogy

a szupravezető rezponzt a szennyezések nem befolyásolják (a fázisfaktorok sorra kiejtik egymást), míg a Peierls-rezponz, átlagolás után, $e^{-2|x_1-x_2|/v\tau_0}$ -os exponenciális csökkenést mutat; ez impulzustérben egy $p \sim 1/v\tau_0$ -os levágással ekvivalens. A parketta számításokban azután ez a levágás ugyanazt eredményezi, mint az előbb látott „befagyás”.

Ezek után megnézzük, hogy $\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}$ módosulásán keresztül a fázisátalakulás jellemzői milyen módon érzik a szennyezők jelenlétét. A kritikus hőmérséklet a (II.3.15) feltételből (III.2.9) felhasználásával

$$T_{\text{MF}} = T_{\text{MF}}^0 \exp \left[\Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T_{\text{MF}}} \right) \right], \quad (\text{III.2.10})$$

ahol T_{MF}^0 az $1/\tau_0=0$ esetre vonatkozik. T_{MF} csökken növekvő koncentrációval és zérussá válik, ha $(2\pi\tau_0)^{-1} = \exp [\Psi(1/2)] T_{\text{MF}}^0 \simeq 0,14 T_{\text{MF}}^0$, azaz $\tau_0^{-1} \simeq 0,85 T_{\text{MF}}^0$.

A „crossover” hőmérséklet hasonló képlet szerint változik; a (II.3.50) definícióból (II.3.49) és (III.2.9) segítségével kapjuk:

$$T_{\text{cro}} = T_{\text{cro}}^0 \exp \left[\Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T_{\text{cro}}} \right) \right]. \quad (\text{III.2.11})$$

Az általánosított Ginzburg—Landau-elmélet A, B, C_{\parallel} és C_{\perp} paramétereinek módosulása a szennyezők jelenléte miatt, az előzőkhöz hasonló közelítésben (II.3.30)—(II.3.33) alapján

$$A = -[\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T)]^{-1} \cdot (1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T)). \quad (\text{III.2.12})$$

Ha $t = (T - T_{\text{MF}})/T_{\text{MF}}$ hatványai szerint kifejtünk és lineáris tagig számolunk, akkor $(\Psi', \Psi''$ a diagramma függvény deriváltjai)

$$A = |g_{\perp}^{\perp}| \gamma t \left[1 - \frac{1}{2\pi\tau_0 T_{\text{MF}}} \Psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T_{\text{MF}}} \right) \right]. \quad (\text{III.2.13})$$

A B együttható (II.3.31)-ből vehető. t -ben nulladrendben nem függ a szennyezésektől, $B = B^0$. Hasonlóképpen $C_{\perp} = C_{\perp}^0$; C_{\parallel} viszont mutat t -ben nulladrendben is függést τ_0^{-1} -től. Ehhez (III.2.9) q_{\parallel}^2 -szerinti kifejtésében a lineáris tag együtthatóját kell tekintenünk, mely a válaszfüggvényben megjelenik. Az eredmény

$$C_{\parallel} = -\frac{\gamma(v/\pi T)^2}{32\chi_{\text{ID}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T)} \Psi'' \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau_0 T} \right). \quad (\text{III.2.14})$$

Kis koncentrációnál és t -ben zérus-rendig:

$$C_{\parallel} = C_{\parallel}^0 \left(1 - 5,9 \frac{1}{2\pi\tau_0 T_{\text{MF}}^0} \right). \quad (\text{III.2.15})$$

Szükségünk lesz $\chi_{\text{3D}}^{\text{CDW}}(k, \omega, T)$ -re, a teljes rendszer CDW szuszceptibilitására T_c -nél magasabb hőmérsékleteken, kis k, ω értékekre. (II.3.16) érvényes MF közelítésben, $k \neq 0, \omega \neq 0$ esetén is,

$$\chi_{\text{3D}}^{\text{CDW}}(k_{\parallel}, q_{\perp}, \omega, T) = \frac{\chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(k, \omega, T)}{1 - g_{\perp}^{\perp}(q_{\perp}) \chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(k, \omega, T)}. \quad (\text{III.2.16})$$

Fejtsük ki (III.2.16)-ban $(q_{\perp} - q_{\perp 0}), k_{\parallel}$ és ω szerint; az utóbbi kettőnél (III.2.9) felhasználásával. Kapjuk a

$$\chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\omega) = \frac{\chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T)}{1 - \frac{i\gamma}{4\pi T} \Psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T} \right) |\omega|} \quad (\text{III.2.17})$$

kifejezésen keresztül, hogy (itt q_{\perp} legyen $q_{\perp 0}$ -tól számítva)

$$\chi_{\text{3D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, q_{\parallel}, q_{\perp}, \omega, T) = \chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, 0, 0, T) \times$$

$$\times \left\{ [1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, 0, 0, T)] [1 + \xi_{\parallel}^2 q_{\parallel}^2 + \xi_{\perp}^2 q_{\perp}^2] - \frac{i\gamma}{4\pi T} \Psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T} \right) \omega \right\}^{-1}$$

ahol

$$\xi_{\parallel}^2 = -\frac{\gamma v^2}{32(\pi T)^2} \Psi'' \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi\tau_0 T} \right) (1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{1D}}(\tau_0^{-1}, T))^{-1}, \quad (\text{III.2.19})$$

$$\xi_{\perp}^2 = \frac{1}{2} d_{\perp}^2 s^2 g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T) (1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{1D}}(\tau_0^{-1}, T))^{-1}. \quad (\text{III.2.20})$$

Minthogy $\Psi''(1/2) = -16,8$, $\tau_0^{-1} = 0$ esetén (III.2.19) visszaadja (II.3.48)-at. $\Psi'(1/2) = \pi^2/2$ -vel ugyanekkor ω együtthatója $-i\gamma\pi/8T$. $T \simeq T_c$ esetén (III.2.18)-ban az

$$1 - g_{\perp}^{\perp} \chi_{\text{1D}}^{\text{CDW}}(\tau_0^{-1}, T) \simeq \gamma t \quad (\text{III.2.21})$$

egyszerűsítést lehet alkalmazni. (III.2.18)—(III.2.21) c -függését illetően a leglényegesebb körülmény az, hogy t -ben a tényleges T_c jelenik meg, amelyben a szennyezési effektusok figyelembe lettek véve és egyébként az egész formula olyan, mint $c=0$ -nál. $q_{||}^2$ és ω együtthatóiban felbukkanó járulékos c -függések kis koncentrációk esetén elhanyagolhatók. Az ellenállás fluktuációs járulékának számításánál (III.2.18)—(III.2.21)-et fogjuk felhasználni.

3. T_{cro} , T_G és az elektron állapotsűrűség koncentrációfüggése

(III.2.10) és (III.2.11) kis koncentrációk esetén, azaz $1/\pi\tau_0 T_{MF} \ll -n\ell$

$$\frac{dT_c}{dc} \simeq \frac{dT_{cro}}{dc} \quad (\text{III.3.1})$$

eredményt ad, és itt mindkét derivált negatív. A TTF—TCNQ-n végzett kísérletek eredményeinek interpretálásánál *Gunning és társai* [26] azt javasolták, hogy T_M , a vezetési maximum hőmérséklete, T_{cro} -val egyezne meg. Ezt arra alapozták, hogy a szennyezés mentes esetben a megfelelő kísérleti értékek közelítőleg egyenlőek (T_{cro} kísérleti értékét az I. táblázatban adtuk meg). A jelen modell eredményei alapján azonban azt mondhatjuk, hogy ez az egyezés véletlen és csak a „tisztá” mintáknál érvényesül; a c -függésben már lényeges eltérés mutatkozik meg. Nevezetesen, (III.3.1) szerint T_{cro} c -függése T_c c -függését követi, ugyanakkor a kísérletek szerint (lásd (III.1.1) és (III.1.2))

$$\left| \frac{dT_M}{dc} \right|_{c_0} > \left| \frac{dT_c}{dc} \right|_{c_0}; \quad \frac{dT_M}{dc} > 0 \quad \frac{dT_c}{dc} < 0$$

T_M ugyanakkor T_G c -függését sem követi, azaz T_G -vel sem azonosítható a következő megfontolás szerint: T_G (II.3.43), (II.3.41) és (II.3.42) alapján

$$A = d_{\perp}^2 T^2 B^2 C_{\perp}^{-2} C_{||}^{-1} |_{T_G} \quad (\text{III.3.2})$$

-ből számítandó. Kis c -k esetén, mint láttuk, $B = B^0$, $C_{\perp} = C_{\perp}^0$, valamint (III.2.13) és (III.2.15) felhasználásával

$$t_G = t_G^0 \left(1 + \frac{10,8}{2\pi\tau_0 T_c^0} \right). \quad (\text{III.3.4})$$

Ennek deriváltja c -szerint

$$\frac{dT_G}{dc} = \frac{dT_c}{dc} [1 + t_G^0] + T_c t_G^0 \frac{d}{dc} \left(\frac{10,8}{2\pi\tau_0 T_c^0} \right). \quad (\text{III.3.5})$$

Felhasználjuk, hogy (III.2.10)-ből c -szerint kifejtve

$$T_c \simeq T_c^0 \left(1 - \frac{4,9}{2\pi\tau_0 T_c^0} \right) \quad (\text{III.3.6})$$

és így (III.3.5)

$$\frac{dT_G}{dc} = \frac{dT_c}{dc} (1 - 1,2 t_G^0) \quad (\text{III.3.7})$$

lesz. Minthogy szükségképpen $t_G^0 \ll 1$ és azonkívül $dT_c/dc < 0$, $dT_G/dc < 0$ következik, azaz T_G sem kapcsolható össze, legalábbis közvetlenül, T_M -mel.

A III.1. pontban ismertettük — TTF—TCNQ esetére — azt a kísérleti tényt, hogy $T > 60$ K-nél a mágneses szuszeptibilitás csaknem teljesen független c -től. Ez, a jól ismert kapcsolat révén, az elektron állapotsűrűség hasonló érzéketlenségét jelzi. Kérdés, hogy ez a tény modellünk keretein belül értelmezhető-e?

Az $N(0)$ elektron állapotsűrűség szennyezésfüggésével kapcsolatosan közelítő számítást vázolunk. $N(0)$ meghatározására egy, az irodalomból jól ismert, az 1D Ginzburg—Landau-modellre felállított formulát alkalmazunk (*Lee, Rice és Anderson* [28]). Így

$$N(0) = N_0 \frac{v}{2\tilde{\Psi}_{\xi_{\parallel}}} \left(1 + \frac{v^2}{4\xi_{\parallel}^2 \tilde{\Psi}^2} \right)^{-1/2}, \quad (\text{III.3.8})$$

ahol a II.3.5 alpontban leírt pszeudogap számítás jelöléseit használtuk. Ez a formula az 1D tartományban érvényes, közelítésünkben tehát magasabb hőmérsékletek felől extrapolálunk T_c környékére. Az 1D esetben (II.3.65)-ből

$$\tilde{\Psi} = 2,63 \frac{|g_1|}{\pi v} T |\pi v \chi_{1D}^{\text{CDW}}|^{1/2} \quad (\text{III.3.9})$$

és ξ_{\parallel} az 1D koherenciahossz. $N(0)$ szennyezésfüggése χ_{1D}^{CDW} -n és ξ_{\parallel} -on keresztül lép fel; kis koncentrációknál

$$\frac{v}{2\tilde{\Psi}_{\xi_{\parallel}}} \simeq \frac{0,84}{(|g_1|/\pi v) |\pi v \chi_{1D}|^{1/2}} \left(1 + \frac{5}{2\pi\tau_0 T} \right). \quad (\text{III.3.10})$$

Nyilvánvaló (III.3.8)-ből, hogy a szennyezés csak akkor juthat szerephez, ha $v/2\tilde{\Psi}_{\xi_{\parallel}}$ kicsi

$$\frac{v}{2\tilde{\Psi}_{\xi_{\parallel}}} \ll 1 \quad (\text{III.3.11})$$

ezért

$$\frac{v}{2\tilde{\Psi}_{\xi_{\parallel}}} \simeq 1, \quad \text{ha} \quad T = T_1 \quad (\text{III.3.12})$$

tekinthető a T_1 határhőmérsékletet megadó feltételnek. A tapasztalat szerint $T_1 \simeq T_{\text{cro}}$. T_{cro} -nál viszont $\chi_{1D}(T_{\text{cro}}) \simeq (4/5)g_1^{\perp}$. Ha tehát a (III.3.12)-ből ezzel kapható

$$(|g_1^{\perp}|/\pi v)^{1/2} |g_1/\pi v|^{-1} \simeq 1 \quad (\text{III.3.13})$$

nagyságrendileg teljesíthető, akkor elméletünk szemi-kvantitatíve magyarázni tudja azt a tényt, hogy $T > T_{\text{cro}}$ esetén a szennyezések nincsenek $N(0)$ -ra hatással. $|g_1^{\perp}|/\pi v \simeq 0,05$, $|g_1|/\pi v \simeq 0,2$ olyan paraméterértékek, melyek ésszerűek (l. a II.3.4 alpontot) és ugyanakkor a fenti kikötésnek is elegendőek.

4. Ellenállás az 1D és 3D fluktuációs tartományokban

Inkommenzurábilis esetben az elektronok számára a legfőbb relaxációs mechanizmus a szennyezéseken való szóródás [69]. Az ellenállás számolása általában két-féle formalizmus keretében történik: 1. az áram-áram válaszfüggvény-, vagy Kubo-formalizmus [86], 2. az impulzus relaxációs idő formalizmus egyaránt használatosak az irodalomban [64, 69, 73–78]. Az utóbbinak egy, a jelen probléma szempontjából igen alkalmas megformulázása *Mori* [87] és *Götze és Wölfle* [88] nevéhez fűződik. Eredményük szerint a szennyezésen való szórás relaxációs ideje Born-közelítésben

$$\frac{1}{\tau} = \frac{c}{\omega} U^2 \sum \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial k'} \right)^2 \text{Im} \chi_{3D}^{\text{CDW}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \frac{\pi}{v_L} \quad (\text{III.4.1})$$

1. τ és az ellenállás kapcsolata

$$\varrho = \frac{m^*}{ne^2} \frac{1}{\tau}. \quad (\text{III.4.2})$$

Itt n az elektronok sűrűsége, m^* effektív tömeg, ε a kinetikus energia. A (III.4.1) formulában a

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial k'} \simeq v(k - k') \simeq 2k_F \quad (\text{III.4.3})$$

közelítéssel élhetünk, hiszen $\chi_{3D}^{\text{CDW}} k - k' \simeq 2k_F$ -nél igen nagy az egyéb helyeken felvett értékeihez képest.

A szigorúan 1D Fermi-gáz modell keretében, III.4.1 alapján *Lee és társai* [64] számolták ϱ -t; egy numerikus faktortól eltekintve, melyet ők kifejejtettek, eredményük a mieinkből majd speciális esetként visszaadódik. T_c közelében viszont más modell alapján, nevezetesen a CDW állapot elektron-fonon modelljéből, *Fukuyama, Rice és Varma* [73] származtatták le a már említett $t^{-1/2}$ -es fluktuációs járulékot az ellenálláshoz, ugyancsak III.4.1-et hasznosítva.

A jelen pontban $1/\tau$ -t a kvázi-1D Fermi-gáz modell alapján számoljuk ki. Így egyrészt számot tudunk adni a láncon belüli feltehetően nem túl gyenge Coulomb-kölcsönhatásról is (melynek fontossága az irodalomból jól ismeretes [89]) és az elektron-fonon kölcsönhatásról sem feledkezünk meg, amennyiben az mint egy effektív, vonzó, elektron-elektron kölcsönhatás g_1 -en keresztül figyelembe vétetik. Másrészt az eljárásunk $1/\tau$ -t az 1D–3D „crossover” tartományban is megadja, ugyanakkor, amikor a $T \gtrsim T_c$ -nél kiadódó hőmérsékletfüggés az elektron-fonon modelles számítás $t^{-1/2}$ -es alakjával vág egybe. Lényeges azonban, hogy $t^{-1/2}$ együtthatójának numerikus értékét is meghatározzuk és a kísérleti eredményekkel összevetjük.

(III.4.1)-ben χ_{3D}^{CDW} helyébe a (III.2.18) képletben kifejezett eredményünket helyettesítjük be, majd q_{\parallel} és q_{\perp} szerint azok maximális q_{\parallel}^m és q_{\perp}^m értékéig ki-

integrálunk ($k_{\parallel} - k'_{\parallel} - 2k_F \equiv q_{\parallel}$, $k_{\perp} - k'_{\perp} - q_{\perp 0} \equiv q_{\perp}$). Kapjuk, hogy

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2cU^2}{v} \frac{\sqrt{2}\pi\gamma^{1/2}}{8s^2(|g_1^{\perp}| \pi v)} \left[-\arctg \left\{ \frac{\gamma}{2} \frac{v^2}{\pi^2 T^2} q_{\parallel}^2 \left(1 + g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW} \left(\frac{1}{2} s^2 d_{\perp}^2 q_{\perp}^2 - 1 \right) \right)^{-1} \right\}^{1/2} \times \right. \\ \times \left. \left(1 + g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW} \left(\frac{1}{2} s^2 d_{\perp}^2 q_{\perp}^2 - 1 \right) \right)^{-1/2} + \arctg \left\{ \frac{\gamma}{2} \frac{v^2}{\pi^2 T^2} q_{\parallel}^2 (1 - g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW})^{-1} \right\}^{1/2} \times \right. \\ \left. \times (1 - g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW})^{-1/2} \right] \quad (\text{III.4.4})$$

$s=1/\sqrt{2}$, $\gamma \simeq 1$, $q_{\perp}^2 \simeq \pi/d_{\perp}$, $q_{\parallel}^2 \simeq k_F^2$ értékeket véve, amikor is $\frac{\gamma}{2} \frac{v^2}{\pi^2 T^2} q_{\parallel}^2 \gg 1$, (III.4.4)-ből kapható:

1. magasabb hőmérsékleteken (1D tartomány)

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{2,1}{\tau_0} (v\pi\chi_{1D}^{CDW}). \quad (\text{III.4.5})$$

2. $T \gtrsim T_c$ -re, amikor is $g_1^{\perp} \chi_{1D} = 1$ vehető

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{1}{\tau_0} \frac{1,7}{|g_1^{\perp}| \pi v} t^{-1/2} \quad (\text{III.4.6})$$

(III.4.4)-et az egész hőmérsékleti tartományban jól közelítő interpolációs formulaként

$$\frac{1}{\tau} \Big|_{\text{int.}} \simeq \frac{1}{\tau_0} \frac{1,7}{|g_1^{\perp}| \pi v} \frac{g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW}}{(1 - g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW})^{1/2}} \quad (\text{III.4.7})$$

szolgálhat. (III.4.7)-et a fenomenologikus, c -független ellenállás-komponenssel (l. (III.1.3)-at) összeadva, az így kapható

$$\varrho = \varrho_1 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{2,3} + \beta c \frac{g_1^{\perp} \chi_{1D}^{CDW}}{(1 - g_1^{\perp} \chi_{1D})^{1/2}}, \quad (\text{III.4.8})$$

$$\beta = \frac{m^*}{ne^2} \frac{2U^2}{v} \frac{1,7}{|g_1^{\perp}| \pi v} \quad (\text{III.4.9})$$

kifejezés lesz most félkvantitatív vizsgálatunk kiindulópontja.

A vezetőképesség maximumának hőmérsékleténél (III.4.8)-nak minimuma van:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial T} \Big|_{T_M} = 0, \quad (\text{III.4.10})$$

ahonnan, $1 - g_1^{\perp} \chi_{1D} \simeq t$ -vel

$$t_M \simeq \left[\frac{c\beta(T_M/T_0)^2}{4,6\varrho_1(T_M/T_0)^{2,3}} \right]^{2/3} \quad (\text{III.4.11})$$

$\varrho_1 T_0^{-2,3}$ értékét a tapasztalatból vesszük (l. (III.1.4)), β -t pedig (III.4.9)-ből határozzuk meg a következő lépésekben. U^2/v -re kielégítő elméleti adat nem ismeretes.

Éppen ezért dT_c/dc (III.2.10)-ből c -szerinti sorfejtés után előálló kifejezését használjuk fel, aszerint:

$$\frac{2U^2}{v} \simeq 1,3 \left. \frac{dT_c}{dc} \right|_{c_0} \quad (\text{III.4.12})$$

m^*/ne^2 -et Chiang et al. [25]-től vesszük, ahol

$$\frac{ne^2 b}{m^* v} \simeq (500 - 1000) \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$$

található; itt b a lánc rácsállandója, $b/v \simeq (1500 \text{ K})^{-1}$ a TTF—TCNQ-nak megfelelő érték. Végül $|g_1^\perp/\pi v| \simeq 0,05$ -öt helyettesítünk be (III.4.9)-be és kapjuk, hogy

$$\beta \simeq 7 \cdot 10^{-3} \Omega \text{ cm}/\% \quad (\text{III.4.13})$$

(III.4.11)-ből mindezek segítségével $c=c_0$ -nál $t_M^0 \simeq 0,3$ adódik. A kísérleti érték $t_{M \text{ exp}}^0 \simeq 0,12$.

Ezután vizsgáljuk meg T_M c -függését c_0 közelében. (III.4.11) c -szerinti differenciálásával

$$\frac{1}{T_M} \frac{dT_M}{dc} = \left(0,3 + \frac{3}{2} \frac{T_M}{t_M T_c} \right)^{-1} \left[\frac{1}{c} + \left(\frac{3}{2} \frac{T_M}{t_M T_c} - 2 \right) \frac{dT_c}{dc} \frac{1}{T_c} \right] \quad (\text{III.4.14})$$

kapható. (III.4.14)-et $c=c_0$ -nál véve a következő numerikus értékek adódnak. A $dT_c/dc|_{c_0} = -150 \text{ K}/\%$ tapasztalati adat (lásd III.1) és $t_M^0 \simeq 0,3$ elméleti érték behelyettesítése

$$\left. \frac{dT_M}{dc} \right|_{c_0} \simeq 270 \text{ K}/\%$$

-ra, míg $t_{M \text{ exp}}^0 \simeq 0,12$

$$\left. \frac{dT_M}{dc} \right|_{c_0} \simeq 870 \text{ K}/\%$$

-ra vezet. A kísérleti érték a kettő között fekszik ((III.1.2)); az egyezés ismét csak kielégítőnek mondható.

Közelítőleg értékeljük ki a (III.1.3) tapasztalati összefüggésben szereplő α együttható értékét a modell adta összefüggések segítségével. Magasabb hőmérsékletekre a (III.4.5) kifejezést származtattuk le. Itt durva becslésként $|g_1^\perp \chi_{1D}| \simeq 1/2$ -et írva

$$\alpha = \frac{m^*}{ne^2} \frac{2U^2}{v} \frac{\pi v}{|g_1^\perp|} = \beta/1,7 \quad (\text{III.4.16})$$

jön ki, azaz $\alpha \simeq 4,1 \cdot 10^{-3} \Omega \text{ cm}/\%$, jó egyezésben a (III.1.4) alatt megadott tapasztalati értékkel.

Végezetül térjünk vissza még egyszer a Ginzburg-hőmérséklet szerepéhez, melyet érdemes megvizsgálni az ellenállás-adatok tükrében is. Ehhez próbáljuk q -t a (II.3.44) alakra hozni. T_c -hez közel (III.4.8)-ban az első tag hőmérséklet-függését elhanyagolhatjuk és ezt a tagot így írjuk

$$\varrho_1 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{2,3} \simeq \varrho_1 \left(\frac{T_c^0}{T_0} \right)^{2,3} \simeq 2c_0 \alpha \simeq 1,2c_0 \beta, \quad \text{ha } T \simeq T_c, \quad (\text{III.4.17})$$

ahol a második, körülbelüli egyenlőség kísérleti eredetű, míg a harmadiknál a jelen pont eredményét hasznosítottuk. Továbbá (III.4.8) második tagjában az (II.3.45)-ből nyerhető

$$\frac{1}{\sqrt{t}} \simeq \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\xi_{ph}}{\xi_{GL}} \quad (\text{III.4.18})$$

összefüggés kerül kihasználásra. Ezután kapjuk, hogy

$$\varrho(c = c_0) \simeq 1,2c_0\beta \left(1 + 0,3 \frac{\xi_{ph}}{\xi_{GL}}\right). \quad (\text{III.4.19})$$

Hasonlóan $\varrho^{-1}d\varrho/dT$ $c=c_0$ -nál így írható

$$\frac{1}{\varrho} \frac{d\varrho}{dT} \Big|_{c_0} \simeq \frac{1,5}{T_c^0} \left(1 - 0,01 \left(\frac{\xi_{ph}}{\xi_{GL}}\right)^3\right) \quad (\text{III.4.20})$$

T_G -nél, ahol $\xi_{ph}/\xi_{GL}=1$, $\varrho^{-1}d\varrho/dT$ -ben a fluktuációs tag elhanyagolhatóan kicsi, míg ϱ -ban ugyancsak jelentős. Ez teljes összhangban áll a III.1. pont 30. ábráján demonstrált ténnyel, miszerint $\varrho^{-1}d\varrho/dT$ -ben a kritikus (3D) fluktuációk hatása csak T_c -hez igen közel észlelhető (és ezért ezt a mennyiséget használják T_c meghatározására), míg ϱ -ban ugyanezen fluktuációk viszonylag szélesebb hőmérsékleti tartományban érvényesülnek, nevezetesen $t_{F1} \simeq t_M$ -re. Így tehát $T_G \cong T_M$ tűnik az ellenállás adatokból ésszerű következtetésnek, és ez az érték egyezik azzal, amit a fajhóból következtettünk (II.3.4 alpont).

(III.4.19) és (III.4.20) jó illusztrációként szolgálhat mindahhoz, amit a (II.3.44) kifejezés kapcsán elmondtunk: t_G meghatározása, valamely, „kritikus” anomáliát mutató kísérleti görbe alapján, sok körültekintést igényel, így pl. a $\varrho^{-1}d\varrho/dT$ mutatta csúcs félszélessége helyének T_G -vel való azonosítása csalóka eredményre vezetne.

Befejezésül a III. táblázatban összefoglaltuk a jelen pontban kapott eredményeket és a megfelelő kísérleti értékeket.

III. TÁBLÁZAT

	t_{cro}	t_G	t_M	$\frac{dT_M}{dc} \Big _{c_0}$	α
Kísérlet TTF—TCNQ	0,12—0,15	0,1—0,2	0,12	500 K/%	$5 \cdot 10^{-8} \Omega \text{ cm}/\%$
Jelen elmélet	0,3	< 1	0,3	270—870 K/%	$4 \cdot 10^{-8} \Omega \text{ cm}/\%$

ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a kvázi-1D vezető rendszerek elméletének néhány alapvető problémáját tárgyaltuk egy egyszerű modell keretében.

Központi szerepet játszott egy olyan közelítés megfogalmazása, mely a kölcsönhatások anizotrop jellegén alapul, tehát azon, hogy a láncbeli kölcsönhatások sokkal

erősebbek, mint a láncok közöttiek. Általánosított MF (vagy Landau-) közelítésünk olyan, hogy az 1D problémát a lehetőséghez képest egzaktul kezeljük — megfelelően annak, hogy a kvázi-1D vezetők viselkedésében alapvetőek szálszerű összetevők jellegzetes 1D tulajdonságai — és csak a láncok között ható, Coulomb-jellegű kölcsönhatásban alkalmaztunk MF-közelítést.

Az 1D vezető rendszer leírására a Bücskov, Gorkov és Dzsalosinszkij nevéhez fűződő kölcsönható Fermi-gáz modellt fogadtuk el kiindulásul. A soktest problémái leírás alaplmenységeinek: a vertex függvénynek és egyrészecke Green-függvénynek a meghatározását a multiplikatív renormálási csoport módszer segítségével végeztük el. Mindenekelőtt meghatároztuk a rendszert jellemző invariáns csatolásokat, melyek a fizikai mennyiségek számításának alapkövei és melyek viselkedésében a rendszer jellegzetességei tükröződnek. A vezető logaritmikus közelítésen túlmenve az ún. másodrendű renormálási csoport közelítésben sikerült olyan megoldást találnunk, mely mentes volt a korábbi számítások mutatta nemfizikai szingularitástól és helyes alapnak bizonyult a zérus hőmérsékleten lehetséges különféle instabilitások (CDW, SC, SDW) feltérképezése szempontjából, amint erről az irodalomban található, későbbi, egzakt és közelítő módszerek segítségével végzett kutatások tanúsodnak.

Az 1D vezető rendszer legfontosabb tulajdonságainak ismeretében nekiláthattunk a csatolt probléma vizsgálatához. A láncok közötti kölcsönhatást egyszerű, Coulomb-típusú kétrészeckés kölcsönhatásként vettük figyelembe. A már említett általánosított MF-közelítésben a CDW fázisátalakulást, a fázisátalakulási pont környezetében észlelhető fluktuációs jelenségeket, valamint a hőmérséklet csökkenésével a magashőmérsékleti fázisban lezajló 1D—3D crossover-t interpretáltuk. A TTF—TCNQ-ra vonatkozó kísérleti adatokból leolvasható Ginzburg-hőmérsékletet és „crossover” hőmérsékletet elméletünkkel szemikvantitatív egyezésben levőnek találtuk. Továbbá, a Fermi-nívónál vett elektron-állapotsűrűség számítása megmutatta, hogy ez csak egy, a T_c körüli igen keskeny hőmérséklet tartományban mutat kollektív eredetű pseudohézagot, és ezáltal támpontot szolgáltatott a frekvenciafüggő vezetőképesség adatokban található anomália értelmezéséhez.

További kísérletekkel való összehasonlítás céljából megvizsgáltuk paramágneses szennyezők hatását a kvázi-1D vezetők viselkedésére a modellünk keretében. A befolyás elsősorban az 1D rendszer elektronjainak szennyezéseken való szóródásán keresztül létesül. Chiang és munkatársai (1978) TTF—TCNQ-n végzett besugárzásos mérései sok új információt szolgáltatottak különféle mennyiségek szennyezéskonzentrációtól való függésének megismeréséhez. Meghatároztuk az ellenállás fluktuációs járulékát a jelen elmélet keretében és a fenomenologikus magashőmérsékleti taggal kiegészítve kiszámítottuk a vezetőképesség maximumának hőmérsékletét és más paramétereket. A kísérleti adatokkal való összehasonlítás kielégítőnek bizonyult.

Mindezek alapján elméleti megalapozását adtuk egy olyan képnek, mely szerint a magashőmérsékleti fázisban a kollektív effektusok igen lényegesek; a hőmérséklet csökkentésével az 1D fluktuációk 3D-típusúakba válnak át. Ez a „crossover” érzeteti hatását a 3D fluktuációkban, melyek mielőtt izotroppá válhatnának, a mindig jelenlevő szennyezések hatására „befagynak”.

Érdemes talán még egyszer megemlítenünk, hogy bár a használt egyszerű modellen keresztül a valóság igen drasztikusan leegyszerűsített másával álltunk

csupán kapcsolatban, leírásunk nem csak kvalitatív, hanem szemi-quantitatív (azaz nagyságrenden belüli egyezést adó) értelemben is sikeresnek bizonyult.

A megoldatlan kérdések közé tartozik az elektron-fonon rendszer együttesének olyan kezelése, mely az elektrongázt megfelelően magas közelítésben tárgyalja. A fononokon keresztül dinamikai jellemzők számítása is lehetségessé válna az elmélet keretében és ez igen kiszélesítené a kísérletekkel összevethető eredmények körét. Továbbá, más típusú lánc-közötti kölcsönhatások, láncok közötti elektron „hopping” befoglalása segítségével, a bevezetésben már említett, nyomás hatásának kitett rendszerekben újabban megfigyelt szupravezető állapotba való átalakulás jelensége elméletileg követhetőnek tűnik.

Mindezen problémák megoldása a közeli jövő feladatai közé tartozik, és további fontos lépést jelent majd a szilárdtest-fizikának ezen új és nagy érdekességű területe megértésében.

IRODALOM

1. Összefoglaló munka: *G. A. Toombs*, Phys. Rep. 40, 181—240, 1978.
2. *Peierls R. E.*, Quantum Theory of Solids. Oxford Univ. Press London 1955. 108. old.
3. *Kohn W.*, Phys. Rev. Lett. 2, 393, 1959.
4. *Craven R. A., Salamon M. B., De Pasquali G., Herman R. M., Stucky G. és Schultz A.*, Phys. Rev. Lett. 37, 769, 1974.
5. *Fröhlich H.*, Proc. Roy. Soc. A233, 296, 1954.
6. *Rice M. J., Strässler S.*, Solid State Commun. 13, 125, 1973.
7. *Rice M. J., Strässler S.*, Solid State Commun. 13, 1389, 1973.
8. *Horovitz B., Weger M., Gutfreund H.*, Phys. Rev. 139, 1246, 1974.
9. *Bychkov. Yu. A., Gorkov L. P., Dzsalosinszkij I. E.*, Zsetf. 50, 738, 1966.
10. *Dzsalosinszkij I. E., Larkin A. I.*, Zsetf. 61, 791, 1971.
11. *Gell-Mann M., Low F. E.*, Phys. Rev. 95, 1300, 1954.
12. *Bogolyubov N. N., Sirkov D. V.*, Introduction to the Theory of Quantized Fields. Interscience Publ. New York 1959.
13. *Menyhárd N., Sólyom J.*, J. Low. Temp. Phys. 12, 529, 1973.
14. *Sólyom J.*, J. Low Temp. Phys. 12, 547, 1973.
15. *Luther A., Emery V. J.*, Phys. Rev. Lett. 33, 589, 1974.
16. *Lee P. A.*, Phys. Rev. Lett. 34, 1247, 1975.
17. *Horovitz B., Gutfreund H., Weger M.*, Phys. Rev. B12, 3174, 1975.
18. *Horovitz B., Birnboim A.*, Solid State Comm. 19, 91, 1976.
19. *Gorkov L. P., Dzsalosinszkij I. E.*, Zsetf. 67, 397, 1974.
20. *Menyhárd N.*, J. Phys. A. 8, 1982, 1975.
21. *Mihály L., Sólyom J.*, J. Low. Temp. Phys. 24, 579, 1976.
22. *Klemm R. A., Gutfreund H.*, Phys. Rev. B14, 397, 1976.
- 23a. *Menyhárd N.*, Solid State Commun. 21, 495, 1977.
- 23b. *Menyhárd N.*, Organic Conductors and Semiconductors Editors Pál L., Grüner G., Jánossy A., Sólyom J. Springer, 1977. p. 165.
24. *Jerome D., Mazaud A., Ribault M., Bechgaard K.*, J. de Physique 1980, megjelenés alatt.
25. *Chiang C. K., Cohen M. J., Newman P. R., Heeger A. J.*, Phys. Rev. B16, 5163, 1977.
26. *Gunning W. J., Chiang C. K., Heeger A. J., Epstein A. J.*, Preprint 1978.
27. *Menyhárd N.*, Z. für Physik B36, 335, 1980.
28. *Lee P. A., Rice T. M., Anderson P. W.*, Solid State Commun. 14, 703, 1974.
29. *Pietronero L., Strässler S., Toombs G. A.*, Phys. Rev. B12, 5213, 1975.
30. *Rice M. J., Bishop A. R., Krumhansl J. A., Trullinger S. E.*, Phys. Rev. Lett. 36, 432, 1976.
31. *Menyhárd N., Sólyom J.*, J. Low. Temp. Phys. 21, 431, 1975.
32. *Sólyom J.*, Advances in Physics. 1979.
33. *Menyhárd N.*, J. Phys. C11, 2207, 1978.
34. *Menyhárd N.*, J. Phys. C12, 1297, 1979.
35. *Gutfreund H., Horovitz B., Weger M.*, Solid State Commun. 15, 849, 1974.
36. *Gorkov L. P., Rashba E. I.*, Solid State Commun. 27, 1211, 1978.

37. *Boncs-Brujevics V. L., Tyablikov S. V.*, Metod funkcii Grina v sztatisticeszkoi mehanike, Fizmatgiz, Moskva, 1961.
38. *Abrikosov A. A., Migdal A. A.*, J. Low Temp. Phys. 3, 519, 1970.
39. *Fowler M., Zawadowski A.*, Solid State Commun. 9, 471, 1971.
40. *Di Castro C.*, Lett. Nuovo Cim. 5, 69, 1972.
41. *Wilson K. G.*, Rev. Mod. Phys. 47, 773, 1975, és *Wilson K. G., Kogut J.*, Phys. Reports 12C, 75, 1974.
42. *Solyom J.*, Magy. Fiz. Foly. 26, 126, 1978.
43. *Fowler M.*, Solid State Commun. 18, 241, 1976.
44. *Ting C. S.*, Phys. Rev. B13, 4029, 1976.
45. *Reyazi E. H., Sak J., Talukdar S.*, Phys. Rev. B19, 4757, 1979.
46. *Gorkov L. P.*, Ferroelectrics 16, 13, 1977.
47. *Tomonaga S.*, Prog. Theor. Phys. 5, 349, 1950.
48. *Fukuyama H., Rice T. M., Varma C. M., Halperin B. I.*, Phys. Rev. B5, 3775, 1974.
49. *Efetov K. B., Larkin A. I.*, Zsetf. 66, 2290, 1974.
50. *Gorkov L. P.*, Zsetf. 34, 735, 1958.
51. *Gorkov L. P.*, Zsetf. 36, 1918, 1959.
52. *Rice T. M.*, Phys. Rev. A140, 1889, 1965.
53. *Hohenberg P. C.*, Phys. Rev. 158, 383, 1967.
54. *Solyom J.*, Solid State Commun. 17, 63, 1975.
55. *Kimura M.*, Prog. Theor. Phys. 53, 955, 1979.
56. *Scalapino D. J., Imry Y., Pincus P.*, Phys. Rev. B11, 2042, 1975.
57. *Abrikosov A. A., Gorkov L. P., Dzsalosinszkij I. E.*, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics (Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 1963) § 15.
58. *L. pl. Ferrell R. A.*, Lectures on Superconductivity, Batsheva Seminar on Quantum Fluids 1968. New York, Gordon és Breach. 1970.
59. *Barisič S., Marčelja S.*, Solid State Commun. 7, 1396, 1969.
60. *Ginzburg V. L.*, Fiz. Tverd. Tela 2, 2031, 1960.
61. *Menyhárd N.*, Solid State Commun. 8, 1337, 1970.
62. *Dietrich W.*, Adv. in Physics 25, 615, 1976.
63. *Thouless D. J.*, Ann. Phys. NY 10, 553, 1960.
64. *Lee P. A., Rice T. M. és Klemm R. A.*, Phys. Rev. B15, 2984, 1974.
65. *Khanna S. K., Pouget J. P., Comes R., Garito A. F. és Heeger A. J.*, Phys. Rev. B16, 1468, 1977.
66. *Sadovskij M. V.*, Solid St. Phys (USSR) 16, 2504, 1974.
67. *Tanner D. B., Jacobsen C. S., Garito A. F. és Heeger A. J.*, Phys. Rev. B13, 3381, 1976.
68. *Bjeliš A., Barisič S.*, J. Physique Lett. 36, 169, 1975.
69. *Gorkov L. P., Dzsalosinszkij I. E.*, Zsetf. Pis. Red. 18, 686, 1973.
70. *Seiden P. E., Cabib D.*, Phys. Rev. B13, 1846, 1976.
71. *Cooper J. R.*
72. *Horn P. M., Guidotti D.*, Phys. Rev. B16, 491, 1977.
73. *Fukuyama H., Rice T. M., Varma C. M.*, Phys. Rev. Lett. 33, 305, 1974.
74. *Bardeen J.*, Solid State Commun. 13, 354, 1973.
75. *Patton B. R., Sham L. J.*, Phys. Rev. Lett. 31, 631, 1973.
76. *Strässler S., Toombs G. A.*, Physics Letters 46A, 321, 1974.
77. *Patton B. R., Sham L. J.*, Phys. Lett. 47A, 133, 1974.
78. *Patton B. R., Sham L. J.*, Phys. Rev. Lett. 33, 638, 1974.
79. *Mott N. F., Twose W. D.*, Adv. Phys. 10, 107, 1961.
80. *Berezinskij V. L.*, Zsetf. 65, 1251, 1973.
81. *Schuster H. G.*, Solid State Commun. 14, 127, 1974.
82. L. pl. 73.
83. L. pl. 57. hivatkozásban a § 39-et.
84. *Zawadowski A.*, Zsetf. 54, 1429, 1968.
85. *Abrahams E., Gorkov L. P., Kharadze G. A.*, Journal of Low Temp. Phys. 32, 673, 1978.
86. *Kubo R.*, J. Phys. Soc. Japan 12, 570, 1957.
87. *Mori H.*, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 33, 423, 1965.
88. *Götze W., Wölfe P.*, Phys. Rev. B6, 1226, 1973.
89. *Torrance J. B., Scott B. A. and Kaufman F. B.*, Solid State Commun. 17, 1369, 1975.

ELEKTROMÁGNESES HULLÁMOK ANIZOTROP KÖZEGEKBEN*

NAGY KÁROLY, TÉL TAMÁS

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

Bevezetés

Az átlátszó közegekben értelmezett fotonok fizikai sajátosságait tanulmányozva, foglalkoztunk az anizotrop közegekben terjedő elektromágneses síkhullámok klaszikus elméletének egyes kérdéseivel, valamint a sugárzási tér kvantumelektrodinamikájával. A kvantumelméleti eredményeinket az Acta Phys. Hung.-ban megjelent dolgozatunkban [1] közzétettük. E munkánk során kaptunk olyan eredményeket is a kristályoptika körében, amelyek a tankönyvekben nem szerepelnek, ezért magyar nyelvű közreadásukat indokoltnak találtuk.

1. A kristályoptika alapegyenletei és azok síkhullám megoldásai

Feltesszük, hogy az egész végtelen teret homogén, anizotrop közeg tölti ki, amelynek mágneses permeabilitása nem tér el lényegesen a vákuumbeli $\mu=1$ értéktől. A közeget elektromos szempontból az ε_{ik} dielektromos-együttható-tenzor jellemzi. Ez a tenzor szimmetrikus. Az elektromos indukcióvektor és az elektromos térerősség között a

$$D_i = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ik} E_k, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1)$$

anyagi egyenletek érvényesek. (A vektorok x, y, z komponenseit az index 1, 2, 3 értékeivel jelöljük.)

Mivel ε_{ik} szimmetrikus tenzor, található olyan koordinátarendszer, amelyben a vegyes indexű elemek eltűnnek, és csak a főátlóban állók különböznek zérustól:

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0, \quad \varepsilon_{11} \equiv \varepsilon_1, \quad \varepsilon_{22} \equiv \varepsilon_2, \quad \varepsilon_{33} \equiv \varepsilon_3.$$

Ebben az ún. dielektromos főtengely-rendszerben az anyagi egyenletek:

$$D_i = \varepsilon_i E_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Az elektromágneses teret a

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3a)$$

$$\text{div } \mathbf{D} = 0, \quad \text{div } \mathbf{H} = 0 \quad (3b)$$

Maxwell-egyenletek írják le.

* Érkezett: 1981. dec. 8.

A továbbiakban ezeknek az alapegyenleteknek síkhullám-megoldását vizsgáljuk. A térmennyiségeket tehát a

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{D}_0 e^{i(\omega(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{r})}, \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0 e^{i(\omega(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{r})}, \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}_0 e^{i(\omega(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

alakban keressük, ahol \mathbf{D}_0 , \mathbf{E}_0 és \mathbf{H}_0 konstans vektorok, \mathbf{k} a hullám hullámszámvektora, $\omega(\mathbf{k})$ pedig a frekvenciája. Könnyen látható, hogy a (3) Maxwell-egyenleteknek csak akkor lehetnek (4) alakú megoldásai, ha teljesülnek az alábbi feltételek:

$$\mathbf{D}_0 = -\frac{c}{\omega(\mathbf{k})} (\mathbf{k} \times \mathbf{H}_0), \quad (5a)$$

$$\mathbf{H}_0 = \frac{c}{\omega(\mathbf{k})} (\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0), \quad (5b)$$

$$(\mathbf{k}, \mathbf{D}_0) = 0 \quad (5c)$$

$$(\mathbf{k}, \mathbf{H}_0) = 0. \quad (5d)$$

Mivel \mathbf{D}_0 , \mathbf{E}_0 és \mathbf{H}_0 nem függhet k -tól, az (5a), (5b) egyenletekből következik, hogy $\omega(k)$ -nak arányosnak kell lennie \mathbf{k} abszolút értékével.

Azt írhatjuk tehát, hogy

$$\omega(\mathbf{k}) = v|\mathbf{k}|. \quad (6)$$

A (4) felírásából következik, hogy v a hullám terjedési sebessége, amely nem függ \mathbf{k} nagyságától. Az izotrop rendszerekkel ellentétben azonban v most függhet a hullám terjedési irányától, melyet a

$$\boldsymbol{\kappa} \equiv \mathbf{k}/|\mathbf{k}| \quad (7)$$

egységvektor jelöl ki. Célszerű még bevezetni a

$$v = c/n \quad (8)$$

definícióval a közeg n (≥ 1) törésmutatóját. A fentiek értelmében tehát mind v , mind n függhet $\boldsymbol{\kappa}$ -tól, ezt a függést azonban az egyszerű írásmód kedvéért nem fogjuk expliciten feltüntetni.

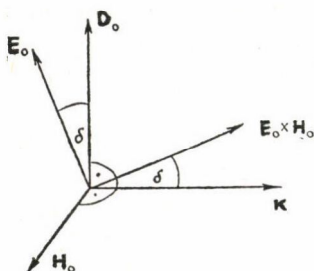
Az (5) egyenletekből közvetlenül leolvasható a bennük szereplő vektorok relatív térbeli elhelyezkedése, ugyanis

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_0 \perp \mathbf{H}_0, \quad \mathbf{D}_0 \perp \boldsymbol{\kappa}, \\ \mathbf{H}_0 \perp \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{H}_0 \perp \boldsymbol{\kappa}, \end{aligned} \quad (9)$$

\mathbf{E}_0 azonban nem merőleges $\boldsymbol{\kappa}$ -ra. A térvektorok irányát az 1. ábra szemlélteti.

Az (5b) egyenlet (5a)-ba történő behelyettesítésével, valamint (6)–(8) felhasználásával a

$$\mathbf{D}_0 = n^2(\mathbf{E}_0 - \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{E}_0, \boldsymbol{\kappa})) \quad (10)$$



1. ábra. A $\boldsymbol{\kappa}$ irányban terjedő síkhullám térerősség vektorainak térbeli elhelyezkedése anizotrop közegben

összefüggést kapjuk, ami a kristályoptika alapvető fontosságú egyenlete, ugyanis az (1) anyagi egyenlet segítségével E_0 irányát és n nagyságát is meghatározza adott terjedési irány esetén. A következőkben végig a dielektromos főtengelyrendszerben fogunk dolgozni. Ekkor (1) a (2) egyenletre egyszerűsödik, s természetesen κ a hullám terjedésének irányát a főtengelyekhez képest adja meg.

A (10) egyenlet szokásos megoldási módja a következő [2, 3]. A (2) anyagi egyenlet felhasználásával (10) az alábbi alakba írható

$$A E_0 = 0, \quad (11)$$

ahol az A mátrix komponensei

$$A_{ij} = n^2(\delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j) - \varepsilon_i \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (12)$$

A (11) egyenletnek triviálistól különböző megoldása csak akkor lehetséges, ha A determinánsa eltűnik, vagyis, ha

$$n^4(\varepsilon_1 \kappa_1^2 + \varepsilon_2 \kappa_2^2 + \varepsilon_3 \kappa_3^2) - n^2[\kappa_1^2 \varepsilon_1 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + \kappa_2^2 \varepsilon_2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) + \kappa_3^2 \varepsilon_3 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)] + \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 = 0. \quad (13)$$

Ennek az egyenletnek két valós pozitív gyöke van, ami azt jelenti, hogy adott terjedési irányhoz két különböző törésmutató, s (8) alapján két különböző fázissebesség tartozik. Adott κ irányban tehát két különböző sebességű síkhullám terjed. Az E_0 térerősség-vektor lehetséges iránya a kapott törésmutató érték (11)-be történő behelyettesítése után határozható meg, a D_0 eltolási vektor komponensei pedig E_0 ismeretében (2)-ből olvashatók le. A kristályoptikával foglalkozó tankönyvekből ismeretes, hogy a két különböző törésmutatójú hullámhoz tartozó D_0 vektorok merőlegesek egymásra [2, 3]. D_0 lehetséges irányait nevezzük polarizációs irányoknak. Az anizotrop közegben terjedő elektromágneses hullámok tehát egymásra merőlegesen lineárisan polarizáltak. E két lehetséges polarizációt jelöljük felül elhelyezett a , ill. b indexszel, pl. D_0^a, D_0^b . A megfelelő fázissebességek

$$v^a = \frac{c}{n^a}, \quad v^b = \frac{c}{n^b}. \quad (14)$$

A (6) egyenletből látszik, hogy adott hullámhosszúságú és terjedési irányú két lineárisan polarizált hullám frekvenciája is különböző.

Most bemutatunk egy, a fenti megoldással ekvivalens eljárást, melynek használata akkor előnyös, ha a polarizációs irányok konkrét meghatározása a célunk. Jelöljük az egyelőre ismeretlen D_0^a , illetve D_0^b polarizációs irányokba mutató egységvektorokat e^a - illetve e^b -vel. Tudjuk, hogy D_0^a és D_0^b egymásra és a terjedési irányra is merőlegesek, tehát

$$(e^a, e^b) = 0, \quad (e^a, \kappa) = 0, \quad (e^b, \kappa) = 0, \quad |e^a| = 1, \quad |e^b| = 1. \quad (15)$$

Ezek az összefüggések még nem határozzák meg az e^a, e^b vektorokat, mert a két egységvektor hat komponensére csak öt egyenletet adnak. Valóban, (15) még nem tartalmazza azt a feltételt, hogy $E_0^{a(b)}$ ugyanabban a síkban van, mint κ és $D_0^{a(b)}$ (l. (9) egyenletet és 1. ábra). Ezt a feltételt úgy is fogalmazhatjuk, hogy E_0^a -nak merőlegesnek kell lennie D_0^b -re. Mivel E_0^a iránya (2) szerint az $(e_1^a/\varepsilon_1, e_2^a/\varepsilon_2, e_3^a/\varepsilon_3)$ vektorral párhuzamos, ez azt jelenti, hogy

$$\sum_{j=1}^3 \frac{e_j^a e_j^b}{\varepsilon_j} = 0. \quad (16)$$

(E_0^b merőlegessége D_0^a -ra ugyancsak a (16) megszorításra vezet.) A (15), (16) egyenletek már egyértelműen meghatározzák a polarizációs irányokat. Ehhez most nincs szükség az n törésmutató ismeretére, mint az előző eljárásban.

Érdekességként megemlíjük, hogy az anizotrop közegek kvantumelektrodinamikai vizsgálatakor azt találtuk, hogy az elektromágneses tér Hamilton-operátora csak akkor diagonalizálható, ha a fotonok polarizációs irányait a (15), (16) egyenletek határozzák meg [1]. Más szóval, anizotrop közegben adott hullámszámú fotonok polarizációs irányai megegyeznek az ugyanolyan hullámszámú klasszikus síkhullámok polarizációs irányával.

A most bemutatott módszer illusztrálásaként megvizsgáljuk az egytengelyű kristály példáját. Egytengelyű kristály esetén két főtengely irányában megegyezik a dielektromos együttható. Ha a z -tengelyt választjuk optikai tengelynek, írhatjuk, hogy

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_{\perp}, \quad \varepsilon_3 \equiv \varepsilon_{\parallel}, \quad (17)$$

A (16) egyenlet ekkor a következőképpen írható:

$$e_1^a e_1^b + e_2^a e_2^b + \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} e_3^a e_3^b = 0. \quad (18)$$

A (15) első egyenletével összevetve, ez csak akkor teljesülhet, ha e_3^a , vagy e_3^b zérus. Legyen $e_3^a = 0$. A (15) második egyenletéből ekkor az

$$e_1^a = -\frac{\kappa_2}{\kappa_1} e_2^a \quad (19)$$

adódik. A (15) negyedik egyenletét is kielégítő megoldás tehát:

$$\mathbf{e}^a = \frac{1}{\sqrt{1 + \kappa_2^2/\kappa_1^2}} \begin{pmatrix} -\kappa_2/\kappa_1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Most meghatározzuk a másik polarizációs irány \mathbf{e}^b egységvektorát. Az \mathbf{e}^a és \mathbf{e}^b egymásra merőleges voltából, valamint (19)-ből következik

$$e_2^b = \frac{\kappa_2}{\kappa_1} e_1^b. \quad (21)$$

Ezt (15) harmadik egyenletébe helyettesítve, kapjuk:

$$e_3^b = -\frac{\kappa_1}{\kappa_3} \left(1 + \frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2} \right) e_1^b. \quad (22)$$

Figyelembe véve az \mathbf{e}^b egységvektor-jellegét kifejező (15) ötödik egyenletét, megkapjuk \mathbf{e}^b egyre normált alakját:

$$\mathbf{e}^b = \frac{1}{\sqrt{1 + \kappa_2^2/\kappa_1^2}} \begin{pmatrix} \kappa_3 \\ \kappa_2 \kappa_3 / \kappa_1 \\ -(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) / \kappa_1 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Ezzel megmutattuk, hogy a (15), (16) hat egyenlet egyszerűen megadja a kristályban haladó elektromágneses síkhullám polarizációs irányait.

Végül megjegyezzük, hogy az a polarizációs irányú síkhullám esetén az eltolási vektor és az elektromos térerősség vektor egymással párhuzamosak (amint az (20)-ból (17) és (2) segítségével leolvasható). Következésképpen ez a hullám hasonlóképpen viselkedik, mint azt izotrop közegek esetén megszoktuk. (L. pl. (31)). Ezért az a polarizációjú hullámot ordinárius sugárnak nevezzük szemben a b extraordinárius sugárral, mely a megszokottól eltérő viselkedést mutat.

Térjünk most vissza az általános esethez! A (15), (16) egyenletek csak a polarizációs irányokat határozzák meg. Annak érdekében, hogy eljárásunk valóban egyenértékű lehessen a szokásossal, meg kell még mondanunk azt is, hogyan adható meg a törésmutató a (15), (16) egyenletek megoldása ismeretében. Ezzel foglalkozunk a következő pontban.

2. A fázissebesség és a törésmutató meghatározása

Az anizotrop közegekben — mint fent láttuk — adott \mathbf{k} irányban általában két különböző fázissebességű, lineárisan polarizált síkhullám terjed. A fázissebességek és a törésmutatók közötti kapcsolatot a (14) egyenletek adják meg. A fázissebességek meghatározásának az a szokásos módja terjedt el, hogy előbb a törésmutatókat számítjuk ki a (13) egyenletből, és ezekből (14) alapján megkapjuk a fázissebességeket. Ehelyett megadunk egy másik eljárást.

Belátható, hogy a két lineárisan polarizált síkhullámra vonatkozó törésmutatókat a polarizációs irányok ismeretében a következő kifejezések adják:

$$\frac{1}{n_{a,b}} = \left[\sum_{j=1}^3 \frac{(e_j^{a,b})^2}{\varepsilon_j} \right]^{1/2}. \quad (24)$$

Most bebizonyítjuk, hogy (24) a törésmutatót meghatározó (10) egyenletnek a két pozitív megoldása. Ehhez (24)-et átalakítjuk a következőképpen.

Az egyszerűbb írásmód kedvéért vegyük csak az egyik polarizációs irányt

$$\mathbf{D}_0^a = |\mathbf{D}_0^a| \mathbf{e}^a, \quad \mathbf{E}_0^a = |\mathbf{D}_0^a| \begin{pmatrix} e_1^a/\varepsilon_1 \\ e_2^a/\varepsilon_2 \\ e_3^a/\varepsilon_3 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Ezeket (24)-be helyettesítve, az így írható:

$$\frac{1}{n_a^2} = \frac{(\mathbf{D}_0^a, \mathbf{E}_0^a)}{|\mathbf{D}_0^a|^2}. \quad (26)$$

Azt kell tehát belátnunk, hogy (26) valóban érvényes. A (10) egyenlet az a polarizációs irányra

$$\mathbf{D}_0^a = n_a^2 (\mathbf{E}_0^a - \kappa (\mathbf{E}_0^a, \kappa)). \quad (27)$$

Szorozzuk meg (27) mindkét oldalát skalárisan \mathbf{E}_0^a -val.

$$(\mathbf{D}_0^a, \mathbf{E}_0^a) = n_a^2 E_0^{a2} - n_a^2 (\kappa, \mathbf{E}_0^a)^2. \quad (28)$$

Ebből

$$n_a^2 = \frac{(\mathbf{D}_0^a, \mathbf{E}_0^a)}{E_0^2 - (\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{E}_0^a)^2}. \quad (29)$$

Az \mathbf{E}_0^a , \mathbf{D}_0^a és $\boldsymbol{\kappa}$ vektorok elrendeződését az 1. ábra szemlélteti. Ebből látszik, hogy fennállnak a következő egyenlőségek.

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}_0^a, \mathbf{E}_0^a) &= |\mathbf{D}_0^a| |\mathbf{E}_0^a| \cos \delta, \\ (\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{E}_0^a) &= -|\mathbf{E}_0^a| \sin \delta. \end{aligned} \quad (30)$$

Ezeket (29)-be beírva, kapjuk:

$$n_a^2 = \frac{|\mathbf{D}^a|^2}{(\mathbf{E}_0^a, \mathbf{D}_0^a)},$$

ami (26)-tal ekvivalens. Ezzel megmutattuk, hogy a törésmutatók egyszerűen számíthatók a (24) képlet alapján.

Lássuk ezt ismét az egytengelyű kristály példáján. Helyettesítsük be (20)-at (24)-be! Adódik:

$$\frac{1}{n_a^2} = \frac{1}{\varepsilon_{\perp}}. \quad (31)$$

Hasonlóképpen kapjuk (23) és (24) alapján:

$$\frac{1}{n_b^2} = \frac{\kappa_3^2}{\varepsilon_{\perp}} + \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}{\varepsilon_{\parallel}}. \quad (32)$$

A megfelelő fázissebességek:

$$v_a = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}}}, \quad (33)$$

$$v_b = c \left\{ \frac{\kappa_3^2}{\varepsilon_{\perp}} + \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}{\varepsilon_{\parallel}} \right\}^{1/2}. \quad (34)$$

Az ordinárius sugár esetén tehát a törésmutató és a fázissebesség konstans, hasonlóan ahhoz, mint izotrop rendszerben, az extraordinárius sugár esetén azonban mindkét mennyiség határozott szögfüggést mutat.

A következő pontban az anizotrop közegbeli elektromágneses síkhullám energia- és impulzusviszonyait vizsgáljuk. A gondolatmenetben lényeges szerepet kap majd az, hogy a törésmutatót ki tudjuk fejezni a polarizációs egységvektorok segítségével.

3. Az elektromágneses síkhullám energiája és impulzusa anizotrop közegekben

A térenergia sűrűségének

$$u(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} [(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)) + H^2(\mathbf{r}, t)]$$

kifejezését alapul véve, a (10), valamint az (5b) összefüggések alapján belátható, hogy az izotrop esethez hasonlóan a síkhullám elektromos energiasűrűsége itt is megegyezik a mágnessel. Ezért

$$u(\mathbf{r}, t) = (\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)). \quad (35)$$

A $\boldsymbol{\kappa}$ irányban terjedő hullámmal együtt energia áramlik, amelynek jellemzésére az energia áramsűrűséget, az ún. Poynting-vektort használjuk. Ennek definíciója

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)). \quad (36)$$

Mivel \mathbf{E} nem merőleges $\boldsymbol{\kappa}$ -ra, az elektromágneses energia nem a hullámterjedés irányában áramlik, hanem azzal δ szöget zár be (l. az 1. ábrát). Fejezzük ki az u energiasűrűséget és az \mathbf{S} Poynting-vektort (10) felhasználásával \mathbf{E} és $\boldsymbol{\kappa}$, ill. \mathbf{k} segítségével:

$$u = n^2(E^2 - (\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{E})^2), \quad (37)$$

$$\mathbf{S} = (\omega/k)n^2(\boldsymbol{\kappa}E^2 - \mathbf{E}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{E})). \quad (38)$$

A polarizációs indexeket az egyszerű jelölés kedvéért ebben a pontban nem írjuk ki. A (37), (38) kifejezések egybevetéséből adódik:

$$u = \frac{1}{\omega}(\mathbf{k}, \mathbf{S}) = \frac{k}{\omega} |\mathbf{S}| \cos \delta. \quad (39)$$

Ez a $k = \omega/v$ összefüggés figyelembevételével így is írható:

$$u = |\mathbf{S}| \cos \delta / v. \quad (40)$$

Itt v a hullám fázissebességét jelenti. (40)-ből látszik, hogy az elektromágneses energia nem a fázissebességgel terjed. Az energiaterjedés \mathbf{v}^* sebességét a

$$\mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{S}}{u} \quad (41)$$

képlettel definiáljuk. A (40), (41) képletekből következik

$$v^* = \frac{v}{\cos \delta}. \quad (42)$$

Mivel anizotrop közegekben (speciális irányoktól eltekintve) a δ szög nem zérus, ezért az energia \mathbf{v}^* áramlási sebessége általában nagyobb a fázissebességnél. A fázissebesség az energiasebességnek a hullám terjedési irányára való vetületével egyezik meg.

A későbbiek szempontjából lényeges, hogy v^* nem lehet nagyobb a vákuumbeli fénysebességnél. Ahhoz, hogy ezt belássuk, mind a Poynting-vektort, mind az energiasűrűséget átalakítjuk.

Az anyagi egyenletek, valamint (10) és (24) felhasználásával kapjuk:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{n} \left(\boldsymbol{\kappa} \frac{D^2}{n^2} - \mathbf{D}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{E}) \right) = \frac{c}{n} D^2 \left(\boldsymbol{\kappa} \sum_{j=1}^3 \frac{e_j^2}{\varepsilon_j} - \mathbf{e} \sum_{j=1}^3 \frac{e_j \kappa_j}{\varepsilon_j} \right), \quad (43)$$

$$u = (\mathbf{D}, \mathbf{E}) = D^2 \sum_{j=1}^3 \frac{e_j^2}{\varepsilon_j}. \quad (44)$$

(41) alapján az energia terjedési sebessége:

$$\mathbf{v}^* = c \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}}{n} - \mathbf{e} n \sum_{j=1}^3 \frac{e_j \kappa_j}{\varepsilon_j} \right). \quad (45)$$

Ennek nagysága

$$v^* = c \sqrt{\frac{1}{n^2} + n^2 \left(\sum_{j=1}^3 \frac{e_j \kappa_j}{\varepsilon_j} \right)^2}. \quad (46)$$

Azt állítjuk, hogy a gyök alatti kifejezés nem nagyobb egynél. Induljunk ki ebből a feltevésből, tehát legyen

$$\frac{1}{n^2} \cong \frac{1}{n^4} + \left(\sum_{j=1}^3 \frac{e_j \kappa_j}{\varepsilon_j} \right)^2. \quad (47)$$

A törésmutató (24) kifejezését felhasználva, ez így írható

$$\sum_{j=1}^3 \frac{e_j^2}{\varepsilon_j} \cong \frac{1}{n^4} + \left(\sum_{j=1}^3 \frac{e_j \kappa_j}{\varepsilon_j} \right)^2. \quad (48)$$

(28) és (26) összevetéséből következik, hogy $n^{-4} + (\boldsymbol{\kappa} \mathbf{E}_0)^2 D_0^{-2} = E_0^2 / D_0^2$, amit (48)-ba helyettesítve adódik:

$$\sum_{j=1}^3 \frac{e_j}{\varepsilon_j} \cong \sum_{j=1}^3 \frac{e_j^2}{\varepsilon_j^2}. \quad (49)$$

Ez viszont biztosan igaz, mert $\varepsilon_j \geq 1$. Ezzel bebizonyítottuk, hogy

$$v^* \leq c. \quad (50)$$

Ezután meghatározzuk a síkhullám elektromágneses impulzusát. Az impulzus-sűrűséget a

$$\mathbf{g} = \frac{1}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \quad (51)$$

képlettel definiáljuk [4, 2]. Az energia áramsűrűség (36) kifejezését (51)-gyel összevetve megkapjuk az energia tehetetlenségét kifejező Planck-féle összefüggést az impulzussűrűség és az áramsűrűség között:

$$\mathbf{g} = \frac{\mathbf{S}}{c^2}. \quad (52)$$

Mivel $S=uv^*$, az impulzussűrűség a

$$\mathbf{g} = \frac{u}{c^2} \mathbf{v}^* \quad (53)$$

alakba írható. Az itt szereplő u/c^2 mennyiség a síkhullám energiasűrűségének megfelelő tehetetlen-tömeg-sűrűség. Az impulzussűrűség kifejezése tehát olyan alakú, amint azt a mechanikában megszoktuk, nevezetesen: tömegsűrűség \times sebesség. Benne a v^* energia terjedési sebesség szerepel, amely — mint láttuk — nem egyezik meg a hullám fázissebességével. Ezek az eredmények természetesen izotrop közegekben is érvényesek, de ott $v^*=v$.

Végezetül megadjuk az energia terjedési sebességét egytengelyű kristályban. A (45), valamint a (20) és (31) egyenletekből következik, hogy az ordinárius sugárra

$$v_a^* = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}} \kappa,$$

ami megegyezik a sugár fázissebességével (l. (33)). Az extraordinárius sugárra viszont (46), (23) és (32) alapján

$$v_b^* = c \left[\frac{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^2 \epsilon_{\parallel}^2 / \epsilon_{\perp}^2}{\epsilon_{\parallel} (\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^2 \epsilon_{\parallel} / \epsilon_{\perp})} \right]^{1/2},$$

ami különbözik a fázissebességtől.

4. Fotonok anizotrop közegekben

Az elektromágneses sugárzással foglalkozó tankönyvekből ismert, (l. például [5]), hogy a forrásmentes, ún. tiszta sugárzási tér előállítható síkhullámok szuperpozíciójaként. A tér energiája és impulzusa különböző hullámhosszúságú síkhullám-energiák és impulzusok összege. A kvantumelektrodinamika szerint ezek a síkhullámok kvantált energiával és impulzussal rendelkeznek. A \mathbf{k} hullámszámmal jellemzett síkhullám energiája és impulzusa vákuumban (a nullponti energiától eltekintve):

$$U_{\mathbf{k}} = \hbar k c n_{\mathbf{k}}, \quad (54)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k} n_{\mathbf{k}}. \quad (55)$$

$n_{\mathbf{k}}$ a 0, 1, 2, ... nem negatív egész számokat veheti fel, $\hbar k c$ az energia, $\hbar \mathbf{k}$ pedig az impulzus kvantuma. A síkhullám ugyanannyi energiakvantumot tartalmaz, mint impulzuskvantumot, hiszen mindegyikben ugyanaz az $n_{\mathbf{k}}$ szám szerepel szorzóként. A $\hbar k c$ energiájú $\hbar \mathbf{k}$ impulzusú kvantumot nevezzük fotonnak. A foton hasonló tulajdonságokkal rendelkezik, mint a részecskék. Nevezetesen, impulzusa és energiája a részecskékhez hasonlóan négyesvektorként transzformálódik, amikor egy inerciarendszerről másikra térünk át. A foton nyugalmi tömege zérus, de a tehetetlen tömege zérustól különbözik és a c^2 -tel osztott energiával egyezik meg. A foton impulzusa a tehetetlen tömegével ugyanolyan kapcsolatban van, mint a részecskék impulzusa: tömeg \times sebesség alakú. A klasszikus mechanikából eredő részecskefogalmat azonban mégsem lehet a fotonra teljesen alkalmazni, mert pl. értelmetlen a foton helyéről vagy pályájáról beszélni.

Mintegy harminc évvel ezelőtt vetődött fel a kérdés, hogy az elektromágneses tér részecsketulajdonságai érvényesek-e átlátszó közegekben is. Itt ugyanis a tér kölcsönhat az atomok vagy molekulák töltött részével, azokat mozgásba hozza, közben energiát és impulzust ad át nekik. A rezgő töltések elektromágneses hullámokat sugároznak, ezáltal energiát és impulzust adnak vissza a térnek. Külön vizsgálatot igényelt annak eldöntése, hogy a fény kvantumos szerkezete megmarad-e ilyen körülmények között is, vagy csak vákuumra korlátozódik. A válasz az izotrop közegekre kidolgozott fenomenológiai kvantumelektrodinamika [6–8] alapján igen volt. Az elektromágneses sugárzás energiája és impulzusa izotrop közegekben is kvantált. A foton energiája [8] $\varepsilon = \hbar k c / n$, impulzusa $\mathbf{g} = \hbar \mathbf{k} / n^2$ (n a közeg törésmutatója). Az energia és impulzus között a vákuumhoz hasonlóan a

$$\mathbf{g} = \frac{\varepsilon}{c^2} \mathbf{v}^*$$

összefüggés érvényes. Ez teljesen olyan alakú, mint a részecskék impulzusa. ε/c^2 a foton tehetetlen tömege, \mathbf{v}^* a sebessége, amely megegyezik az azonos hullámhosszú klasszikus hullám energiájának terjedési sebességével: $v^* = c/n$. A vákuumbeli fotonokhoz képest az a különbség adódott, hogy szigetelőkben a foton nyugalmi tömege nem zérus, hanem

$$m_0 = \frac{\hbar k}{c n^2} \sqrt{n^2 - 1}. \quad (56)$$

A foton $m = \varepsilon/c^2$ tehetetlen tömege és m_0 nyugalmi tömege között a részecskékre jellemző

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^{*2}/c^2}} \quad (57)$$

képlet érvényes. Ez teljesen összhangban van a relativitáselmélettel, hiszen a szigetelőbeli fotonok $v^* = c/n < c$ sebességgel mozognak.

Ezek az eredmények az Abraham [4]- és a Minkowski [9]-féle energia-impulzus-tenzor körüli vitában az Abraham-féle felfogást támogatták, mert a Minkowski-fotonok nem rendelkeznek ilyen részecske-tulajdonságokkal. Példaként említjük csupán, hogy a Minkowski-foton nyugalmi tömege képzetesnek adódik.

Mivel a szakirodalomban az energia-impulzus-tenzor iránti érdeklődés az utóbbi időben újból előtérbe került [10, 11], vizsgálatainkat kiterjesztettük anizotrop közegekre is [1]. Ezek eredményeként kaptuk, hogy az elektromágneses tér energiája kristályos közegekben is kvantált, az energiakvantum nagysága itt is

$$\varepsilon_{a(b)} = \frac{\hbar k c}{n_{a(b)}}, \quad (58)$$

de a törésmutató, mint fentebb láttuk, függ a hullám polarizációs irányától, és ennek megfelelően az energiakvantum is polarizációfüggő.

Az elektromágneses tér impulzusoperátora (az Abraham-féle kifejezést használva) anizotrop közegekben nem cserélhető fel az energia operátorral, ezért e két operátornak nincs szimultán sajátállapota.

Kimutatható viszont, hogy a térimpulzus középértéke impulzuskvantumok összegeként adódik. Ezért azt mondhatjuk, hogy a fotonkép anizotrop közegekre már nem vihető át teljesen, de középértékben itt is érvényes. Az így adódó fotonokat,

ezért „kvázi-részecskék”-nek nevezzük. A fotonok impulzusa:

$$\mathbf{g}^{a(b)} = \hbar \left(\mathbf{k} \frac{1}{n_{a(b)}^2} - e^{a(b)} \sum_{j=1}^3 \frac{e_j^{a(b)} k_j}{\varepsilon_j} \right). \quad (59)$$

Ez a mennyiség is függ a polarizációs állapottól.

A foton energiája, és impulzusa között itt is érvényes a

$$\mathbf{g} = \frac{\varepsilon}{c^2} \mathbf{v}^* \quad (60)$$

összefüggés. A foton sebessége a \mathbf{v}^* energia terjedési sebességgel egyezik meg, amely — mint láttuk — eltér a hullám fázissebességétől. Ez teljesen összhangban van a reális fizikai képpel, hiszen kristályokban az energia és impulzus nem a hullám terjedés irányában áramlik, hanem a \mathbf{v}^* -gal megadott irányban.

A foton nyugalmi tömege

$$m_0^{a(b)} = \frac{\hbar k}{c n_{a(b)}} \sqrt{1 - v_{a(b)}^{*2}/c^2}. \quad (61)$$

Mivel $v^* \leq c$, ezért $m_0^{a(b)}$ valós. Az $m = \varepsilon/c^2$ tehetetlen tömeg és a nyugalmi tömeg között itt érvényes az

$$m^{a(b)} = \frac{m_0^{a(b)}}{\sqrt{1 - v_{a(b)}^{*2}/c^2}} \quad (62)$$

relativisztikus tömegnövekedési képlet.

Összefoglalva azt mondhatjuk tehát, hogy az Abraham-fotonok kristályokban a fenti értelemben kvázi-részecskék, és rendelkeznek a reális részecskékre jellemző tulajdonságokkal. A Minkowski-fotonok viszont ugyanolyan furcsa tulajdonságúak, mint az izotrop közegekben. Például képzetes a nyugalmi tömegük, továbbá impulzusuk nem \mathbf{v}^* irányú. Következésképpen az impulzus itt nem tömeg \times sebesség alakú. Az anizotrop közegek fenomenológiai kvantumelektrodinamikájában tehát az Abraham-féle leírás mellett az szól, hogy az így adódó fotonoknak hasonló tulajdonságaik vannak, mint a valódi részecskéknél, viszont az energia és impulzus nem diagonalizálható egyszerre, vagyis ezek a fotonok csak kvázi-részecskék. A Minkowski-féle leírásnak is megvan a maga előnye, mégpedig az, hogy benne az energia és az impulzus operátora felcserélhető, a két mennyiség egyszerre hozható diagonális alakra. Az így kapott fotonoknak viszont olyan tulajdonságaik vannak, amik eltérnek a megszokottól.

IRODALOM

1. K. Nagy, T. Tél, Phenomenological quantum electrodynamics of anisotropic media, Acta Phys. Hung. 51, 125, 1981.
2. L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Electrodynamics of continuous media, Pergamon Press, Oxford, 1960.
3. M. Born, E. Wolf, Principles of optics, 3rd ed., Pergamon Press, Oxford, 1965.
4. M. Abraham, Rend. Circ. Matem. Palermo 28, 1, 1909; 30, 5, 1910.
5. L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Elméleti fizika IV., Relativisztikus kvantumelmélet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979.
6. V. L. Ginzburg, J. Phys. USSR 2, 441, 1940.
7. J. M. Jauch, K. M. Watson, Phys. Rev. 74, 950, 1948.
8. K. Nagy, Acta Phys. Hung. 5, 95, 1955.
9. H. Minkowski, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 53, 1908. H. Minkowski, Math. Annaln. 68, 472, 1910.
10. V. L. Ginzburg, Theoretical Physics and Astrophysics, Pergamon Press, Oxford, 1979.
11. I. Brevik, Phys. Reports 52, 134, 1979.

KÖNYVISMERTETÉS

M. Schulz, G. Pensl:

Insulating Films on Semiconductors

Proc. 2. Internat. Conf. INFOS 81. Erlangen, Fed. Rep. Germany,

April 27—29, 1981. Springer Verlag 1981

A szilícium alapú mikroelektronika egyik kulcsproblémája a vékony oxid rétegek kialakulása, a Si-SiO₂ átmenet tulajdonságai. A szigetelő oxid, vagy oxid-nitrid rétegek határozzák meg a MOS és MNOS téreffektuson alapuló félvezető eszközök tulajdonságait, működési paramétereit. A legutolsó évtizedben a Si alapú mikroelektronika magas színvonalú technológiájának kifejlődése a Si-SiO₂ rendszer tudományos feltárásának eredménye. A mikroelektronika területén élenjáró gyárak kutatólaboratóriumai nagy súlyt helyeztek a Si-SiO₂ MOS, valamint Si MNOS rendszerek fizikai paramétereinek megismerésére.

Az 1981 évi INFOS konferencia az 1979 évi első durhami konferencia után Erlangenben adott helyet a tudományterület legújabb eredményeinek és jelenlegi helyzetének áttekintésére. A 15 ország, 170 résztvevője 10 szekció keretében számolt be legújabb eredményeiről. A kiadvány 313 oldal terjedelemben közli az 52 elhangzott előadást.

A következőkben a főbb eredményekről adunk rövid áttekintést:

1. I.: A Si-SiO₂ rendszer

F. Herman (IBM) a Si-SiO₂ rendszer elektronszerkezetéről ad összefoglalót, C. R. Helms (Stanford Egyetem) pedig ezen rendszer morfológiájáról, a közti réteg szerkezetéről. Helms legújabb vizsgálatával is megerősíti, hogy a sztöchiometriától eltérő közti réteg kb. 2 monorétegnyi. F. O. Hahn és M. Henzler (Hannoveri Egyetem) az oxidációnál fellépő feldurvulást taglalják. A részleteket mellőzve, a további munkákból csak a hidrogénezés, továbbá a belső feszültségek problémáit említem, valamint a rekombinációt a közti rétegben.

2. II.: Vékony szigetelő rétegek

G. G. Roberts (Durhami Egyetem) a Langmuir—Blodgett felületi rétegekkel bevont félvezető eszközökről adott áttekintést. Ma már ilyen MIS tranzistorok, továbbá InP integrált áramkörök állnak rendelkezésre. A szekció további előadásai a vékony szigetelő rétegek néhány előállítási technológiáját ismertetik (UHV, DC plazma, oxidáció) és adják meg az elért paramétereket. Az 1. és 2. szekcióban alkalmazott vizsgálati eljárások felölelik az AES, EELS, SIMS, RBS felületi elemzéseket, valamint mélységi feltérképezéseket és ellipszometriát. A rétegek elektromos tulajdonságait az ismert I—V, CC—DLTS, C—V, továbbá fotoelektromos vizsgálatokkal tárták fel.

3. Töltés injekció szigetelőkbe

Kiemelem D. J. DiMaria (IBM) széles tiltott sávú szigetelők injekciós jelenségeit taglaló összefoglaló előadását, továbbá D. R. Wolters (Philips) SiO₂ csapba hatásait vizsgáló munkáját.

4. Többréteges szerkezetek

H. Teves és munkatársai (Aacheni Műegyetem) a fém- Al₂O₃-Si₃N₄-SiO₂-Si (MANOS) rendszert ismertetik. Tüttő P. és munkatársai (MFKI, Budapest) MNOS szerkezetekben a felületi állapotok sűrűségének vizsgálatáról számolnak be.

5. Közti rétegek vizsgálati módszerei

A szokványos módszerek mellett érdekes újdonság E. H. Poindexter (US Army Electronics) MOS EPR vizsgálata. A DLTS (mélynívó spektroszkópia) terén a CC- (állandó kapacitás) módszer (Klausmann, Fraunhofer Inst. Freiburg) hozott újat.

6. Átütés és instabilitás a SiO_2 -Si rendszernél

D. R. Wolters (Philips) összefoglaló előadásában az LSI-ben alkalmazott igen vékony SiO_2 rétegek átütési és öregedési jelenségeit tekinti át. Két további munka a hidrogén hatásokat taglalja.

7. Technológia

E. Doering (Siemens) összefoglaló előadása átfogó képet nyújt a MOS és MNOS legkorszerűbb technológiai eljárásairól. Figyelemre méltó R. Hezel (Erlangeni Egyetem) Si-nitrid napelemekkel kapcsolatos munkája, igen nagy töltés sűrűségek kimutatása, továbbá E. J. Korma és munkatársai (Groningeni Egyetem) plazma nitridizálást ismertető munkája.

8. Lézeres technológia

Erről az új technológiai irányzatról csak 3 munka szól. N. M. Johnson (Xerox) amorf hordozókon lézer segítségével kristályosít Si filmeket és állít elő tranzisztort. V. G. I. Deshmukh és munkatársai (Royal Radar, Malvern) a SiO_2 közti réteg lézeres kezelésénél bekövetkező roncsolódásáról szól. Baufay és munkatársai Ge és Al-Sb filmek lézeres kristályosítását ismertetik.

9. Transzport jelenségek inverziós rétegekben

F. Koch (TU. München) összefoglaló előadásában a közti rétegek elektronszerkezetéről ad áttekintést: Si, Ge és GaAs szerkezeteket tárgyal. D. Kohl (Aacheni Egyetem) Si/SiO₂ MOSFET eszközök semleges szóró centrumait tárgyalja.

10. Félvezető vegyület filmek

A konferencia tematikájában kiemelkedően fontos helyet foglalnak el a kutatások előterében álló III—V félvezető vegyületek. G. P. Schwartz (Bell) a Ga-As-O, a Ga-Sb-O, az In-P-O rendszereken taglalja a saját oxid képződés folyamatait, Raman spektroszkópia alkalmazásával. D. C. Cameron és munkatársai (RSRE, Malvern) InP MISFET és MIS rendszereket ismertet. W. S. Lee és munkatársai, L. M. F. Kaufmann és munkatársai vékonyrétegek előállítását ismertetik GaAs-on. Somogyi M. és Farkasné Jahnke M. (MFKI, Budapest) III—V felületek oxidációjának komplex vizsgálatairól számolnak be. A $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,2}\text{Te}$ rendszerrel 3 előadás foglalkozik.

Ezen rövid könyvismertető a teljesség igénye nélkül kíván áttekintést nyújtani az INFOS 81 konferencián bemutatott hatalmas ismeretanyagról. A konferencia kiadványa elsősorban a félvezető technológia és fizika, valamint a mikroelektronika területén dolgozó kutatók és mérnökök számára nyújt alapvetően új eredményekről információt. A könyv emellett forrásmunka a tudományterületen készülő egyetemi doktori, kandidátusi értekezések számára is. Hasznos segítséget és alapot nyújthat diploma munkák elkészítéséhez. Kíváncsok, hogy a kutató intézetek, gyárak és egyetemek, főiskolák könyvtáraiban az olvasók rendelkezésére álljon.

Gergely György

L. Pietronero, E. Tosatti (editors):
Physics of Intercalation Compounds Proceedings of an International Conference,
Trieste, July 6–10 1981
Springer Series in Solid State Sciences, vol. 1. 30.
Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1981

Az interkalációs vegyületek (IKV) fizikája a modern szilárdtest-fizika egyik igen dinamikus fejlődő területe, amely napjainkban még nem rendelkezik specializált publikációs lehetőségekkel. Eppen ezért nagy jelentőségű e kiadvány, amely sűrítve tartalmazza az e területen elért legújabb kutatási eredményeket. Az IKV és közülük elsősorban a grafit donorokkal (alkálifémek) és akceptorokkal (SbCl_5 , FeCl_3) képzett IKV-i 1–2 nagyságrenddel megnövekedett vezetőképességükkel különböznek gazdaanyagaiktól, és ez a növekedés pl. az acetilén IKV-inél 12 nagyságrendet is elérhet. Több IKV szupervezető. Ezek a tények már önmagukban is alátámasztják az IKV nagy elméleti és gyakorlati jelentőségét. A triezsti konferencia anyagát tartalmazó 323 oldal terjedelmű mű hat fejezetre tagolódik. Az első fejezet (9 cikk, 66 oldal) az IKV szerkezetével és általános tulajdonságaival foglalkozik és elsősorban a vezetőképességnek az egyes esetekben UV besugárzással keltett hibaszerkezettől, a kötőhosszaktól és kötőerőségektől való függését, az IKV felületi és doménszerkezetét, ion és elektron bevitellel történő előállításának módjait, továbbá a vezetőképesség mérésére alkalmazott speciális pl. elektrokémiai potenciál és spektroszkópiai módszereket tárgyalja. A második fejezet cikkei (12 cikk, 90 oldal) az IKV elektronszerkezetének vizsgálatában elért elméleti és kísérleti eredményekről adnak számot. Az IKV elektronszerkezetét, az effektív tömegeket, állapot sűrűségeket és vezetőképességét kötésrend alapján iterált Hückel, egyéb SCF, lokalizált sűrűségfunkcionál és „muffin tin” KKR módszerekkel számolják és fotoelektron-szkópiai, szekundér elektronemissziós agneto oszcillációs, NMR, rugalmatlan elektron és neutron, továbbá Raman szórás kísérletekkel mérik. A harmadik fejezet szerzői (66 cikk, 48 oldal) az IKV rácsdinamikájával foglalkoznak, elsősorban rácszorulásokkal és fonon diszperziós görbékkel, továbbá közlik egyes Raman és neutronszórás mérések eredményeit. A negyedik fejezetben (8 cikk, 58 oldal) első része az IKV rövid és hosszútávú rendparamétereivel, lehetséges elemi celláival kapcsolatos kutatások eredményeiről számol be. Itt a fő vizsgálati módszer a röntgendiffrakció. A második részben párhuzamosított számítások (lágy mag és kemény mag közelítés, Percus—Yevick-elmélet) rendezetlenség átalakulások klaszter Hamilton-függvényekkel történő leírása, továbbá egyéb molekuláris dinamikai módszerek és jelenségek elemzése kapott helyet, mint pl. a Peierls-instabilitás, Koesterlitz, Thouless és Holperin—Nelson olvadáselméletek. Az ötödik fejezet (3 cikk, 24 oldal) az IKV kutatásában ESR és NMR módszerekkel elért eredményeket tartalmazza. Az ESR segítségével közepes szabad úthosszakat, állapotsűrűségeket és g-faktor anizotrópiákat határozzák meg. Az NMR mérések alapján levezethető relaxációs idők, Knight eltolódás és kvadrupól konstansok segítségével e vegyületekben sztöchiometriai összetétel eltolódásokra, pi-árnyékolási állandókra, az alkálifém diffúzió aktivációs energiáira és a vakanciák számára következtettek. A hatodik fejezet (5 cikk, 36 oldal) vezetőképesség, szupravezetőképesség, mágneses ellenállás, Hall-effektus, hővezetőképesség és fahő mérésekkel foglalkozó cikkeket foglal magában több esetben a nyomás, a hőmérséklet és a térorősség nagyságának és irányának függvényében. Egyes esetekben hiszterézisgörbék, a fázisátalakulásokat létrehozó kritikus térorősségek nagyságát és irányát, továbbá Ginzburg—Landau-paramétereiket is meghatároztak. Tanulmányozták az adszorpció fázisátalakulásokra gyakorolt hatását, amelyek ilyen esetben néha elmaradnak. A terület interdiszciplináris jellege maga után vonja a mű inkohérens vonásait. Ugyanakkor, függetlenül a szorosabban érdekelt szakemberek és kutatók táborától, szélesebb értelemben vett technikai és tudományos gárdánk számára is nem elhanyagolható haszonnal járhat a mű forgatása, hiszen egymástól távollevőknek hitt módszerek, elméletek találkoznak a szűkebb témakör által alkotott kohóban, minőségileg újat hozva létre és mintegy sugallva hasonló jellegű gondolat, módszer és elméleti társítások alkalmazását ki-ki számára saját munkaterületén.

(R. K.)

Landolt—Börnstein:
Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles
Supplement to Volume 1/7 and Extension to High Energies
Subvolume b: Pion Nucleon Scattering Part 1: Tables of Data

A fizikusok számára klasszikusnak számító Landolt—Börnstein sorozat egy újabb kötete látott napvilágot a Springer kiadó gondozásában. A Landolt—Börnstein sorozat közismerten 6 ún. csoportot foglal magában, ezek közül az I-es a mag és részecskefizika. Ezen az I-es csoporton belül kilenc kötet jelent meg. A 7. kötet, amelynek kiadási éve 1973, tartalmazza az elemi részecskék

rugalmas és töltéscserés szóródásának az adatait. Ehhez kiegészítésként jelent meg 1981. végén a mintegy 400 oldalas 9. kötet, amely az adatok nagyenergiákra való kiterjesztése. Erre elsősorban azért volt szükség, mert a 7. kötet kiadása óta működésbe lépett két nagyenergiájú (400 GeV-os) gyorsító; az egyik a Fermi Nemzeti Laboratóriumban (USA), a másik a CERN-ben és így újabb adatokat szolgáltatott az elmondott területre vonatkozóan. Ez nem jelenti azt, hogy csak a nagyenergiájú adatokat tartalmazza a kötet, tartalmazza az első kiadási év, 1973 óta megjelent alacsony energiájú mérési eredményeket is. A 9. kötetnek van egy a) és egy b) alkötete; jelen ismertetés tárgyát a b1 kötet képezi, ez a pion-nukleon szórási eredményeket tartalmazza táblázatosan. (A b2-es rész az analízist és a szórási amplitúdókat fogja tartalmazni; még nem jelent meg.) A pion-nukleon szórás különös jelentőséggel bír, mivel a pionnak a spinje zero és így a pion-nukleon szórás egyike a legegyszerűbb fundamentális folyamatoknak, amelynek az elméleti értelmezése viszonylag egyszerű.

Jelen kötet tartalmazza az elméleti háttér általános áttekintését, a kísérletek felsorolását, majd következnek a teljes hatáskeresztmetszetek, a differenciális hatáskeresztmetszetek, a polarizációs paraméterek és a spin-rotációs paraméterek (R és A). Mindez a Landolt—Börnsteintől megszokott gondossággal, alaposzággal, részletes irodalmi hivatkozásokkal. Reméljük, hogy ezen új kötet megjelenése hasznos segédeszközt jelent mind az elméleti, mind a kísérleti mag- ill. részecskefizikusok számára.

Kiss Dezső

Neutron Radiography Handbook

D. Reidel holland kiadó vállalat 1981-ben jelentette meg a „Neutron Radiography Handbook (Nuclear Science and Technology)” című könyvet. A 170 oldalas könyv a neutronok gyakorlati alkalmazásának egy érdekes és jelentős területét, a neutron-radiográfiát öleli fel, rendkívül nagy gondossággal és alaposzággal. A könyv anyagának összeállítása az EURATOM egy speciális csoportjának a munkája.

A bevezető fejezetben ismertetik a szerzők, P. von der Hardt és H. Röttger a neutron-radiográfia elveit és alkalmazásának a főbb vonalait. A második fejezetben praktikus tanácsokat adnak a neutron-radiográfiái vizsgálatok előkészítésére, kivitelezésére és értékelésére. A 3. fejezet a radioaktív indikátoroknak van szentelve és tárgyalja azt a kérdést, hogy mitől függ a radioaktív leképezésnek a minősége és pontossága. Külön fejezet foglalkozik a nukleáris fűtőelemek neutron radiográfiás vizsgálatával. Ismerteti a fellépő tipikus meghibásodásokat, amelyeket neutron radiográfiával lehet felismerni. Az utolsó fejezet táblázatokat és különböző mérési sémákat tartalmaz. A könyv alaposága s praktikussága folytán kiválóan alkalmas arra, hogy nemcsak megismertessen a neutron-radiográfia módszereivel, hanem eligazítson minden kisebb-nagyobb technikai kérdésben és kézikönyvül szolgáljon azoknak, akik honosítani vagy továbbfejleszteni akarják ezt az anyagvizsgálati módszert.

Kiss Dezső

D. Berényi and G. Hock (ed.-s): High-Energy Ion-Atom Collisions Proceedings of the International Seminar on High-Energy Ion-Atom Collision Processes Debrecen, Hungary, 17—19 March 1981 Akadémiai Kiadó, Budapest 1982

A Nuclear Methods Monographs sorozat második köteteként adta ki az Akadémiai Kiadó az Elsevier kiadóval közösen az 1981-ben Debrecenben rendezett nemzetközi szeminárium 10 összefoglaló előadását és néhány rövid előadás („contributed papers”) kivonatát. A több ilyen előadás kivonata a szeminárium előtt az ATOMKI Közlemények 23. kötete 1. számában jelent meg.

Az atomi elektronburok tulajdonságainak vizsgálata ion-atom ütközések révén egyike a leggyorsabban fejlődő területeknek az elmúlt 10—15 év fizikájában.

Ennek egyik — kísérleti fizikai — oka, hogy a magfizikai módszerek és eszközök egyre inkább alkalmazást nyertek az atomfizika dinamikus jelenségeinek kutatásában. Ezek a vizsgálatok a természet jelenségeinek megismerése mellett a gyakorlati élet számára is igen fontosak. Pontos atomfizikai adatokra van szükség, a szabályozott fúziós energiatermelés megvalósításához, különböző anyagvizsgálatokhoz, környezetkutatáshoz stb.

Az ion-atom ütközések fizikájának neves kutatói írták a kötet áttekintő cikkeit, amelyek első sorban az ütközés során keletkezett elektronok spektroszkópiájával és e jelenségek elméleti értelmezésével foglalkoznak.

Az ütközés során a target atomokból, illetve bombázó ionokból kilépő elektronok differenciális hatáskeresztmetszete fontos közvetlen információt tartalmaz magára az ütközés mechanizmusára vonatkozólag. Három fejezet foglalja össze az ezen a területen folyó különböző kísérleti és elméleti kutatásokat (M. E. Rudd, L. H. Toburen, N. Stolterfoht). Két fejezetben az Auger-elektronok szögeloszlása vizsgálatának legújabb eredményeiről (W. Mehlhorn), illetve az ütközések során létrejövő több elektron, illetve lyukat tartalmazó állapotok spektroszkópiájáról (J. P. Briand) olvashatunk. Az ion-atom ütközések egyik érdekes területe a molekula-ionok szétrobbanása gáz vagy szilárd targeten való áthaladásuk során. K. O. Groeneveld ismerteti ennek a területnek a legújabb eredményeit.

A Darmstadtban (NSZK) levő nagyenergiájú nehéz-ion gyorsítón folyó atomfizikai vizsgálatokat tekintti át R. Mann, Berényi D. pedig a dubnai nehéz-ion gyorsítókon tervezett hazai kutatási programot foglalja össze a megfelelő publikált eredmények analízisére alapozva.

Három fejezet az ion-atom ütközések elméletével foglalkozik. Részletes áttekintést olvashatunk a különböző elméleti közelítésekről (J. S. Briggs). A másik két cikk pedig a könnyű részek elektronbefogásának (töltéscicserélődésének), illetve a szimmetrikus ütközéseknek az elméletével foglalkozik (L. Kochbach, ill. J. F. Reading).

A kötetet N. Stolterfoht zárszava, valamint a szeminárium programja és a résztvevők listája fejezi be.

Kövér Ákos

**A. Benninghoven, J. Giber, J. László, M. Riedel, M. W. Werner (ed.-s):
Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS III
Springer Series in Chemical Physics, Vol. 19.
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1982**

A szekunder ionizációs tömegspektrometria, mint ismeretes, egyike az utóbbi évtizedben kifejlesztett szilárdtest-vizsgálati módszereknek, amely mind a szilárd testek fizikai szerkezetére, mind pedig a kémiai összetételére ad felvilágosítást. 1981 szeptemberében az NSZK és az USA után éppen Magyarországon rendezték meg e tudományterület harmadik nemzetközi kongresszusát. A Springer kiadó figyelemre méltó gyorsasággal 5 hónap alatt szép kiállítású kötetben, kb. 450 oldalon 289 ábrával jelentette meg a konferencia anyagát: 69 közleményt, közöttük 13 meghívott előadó összefoglaló munkáját. A kötet gyors megjelenése — amelyben nyilván nem kis része volt a kötet szerkesztőinek is — lehetővé teszi, hogy az olvasó valóban a legfrissebb információk birtokosa legyen.

A kötet felépítése követi a konferencia szekcióinak beosztását: 6 fejezetben közli a SIMS elméleti kérdéseit, apparatív újdonságait, ismerteti az új alkalmazásokat. Minden egyes témát bőséges terjedelmű (kb. 15—20 oldalas) összefoglaló közlemény, ill. közlemények vezetnek be. Ezek szerzői a világ vezető SIMS szakemberei. A kutatási eredményeket ismertető közlemények is kellő terjedelemben (kb. 6 oldal) jelenhettek meg.

Az első fejezet a készülékproblémákat tárgyalja. F. G. Rüdenauer összefoglalója a háromdimenziós analízist és annak számítógépes adatfeldolgozását ismerteti. A kötetben található az első részletes munkák a fémionokkal (Cs^+ , In^+) történő bombázás módjáról, előnyeiről. A kvadrupól analízátorok alkalmazása, a lézerbombázás, a szigetelő anyagok vizsgálatának lehetősége a további közlemények tárgya.

A kötet két fejezete is foglalkozik a SIMS elméleti kérdéseivel. Az atomos ionképződés mechanizmusára vonatkozóan jelentősebb újdonságokat nem találunk, a szerzők a meglevő elméletek igazíthatóságára szorítkoznak. Az összetett (cluster) ionok képződésének és a minta szerkezetének kapcsolata azonban egyre inkább előtérbe kerülő kérdés. Ennek tudható be, hogy egyéb előadások mellett az összefoglaló előadás (H. Oechsner) is ezzel a kérdéssel foglalkozik.

Három meghívott előadás is jelzi, hogy a konferencián és a kötetben is kiemelt hangsúlyt kapott a mélységi koncentrációprofilok felvételének elmélete. Több közlemény számos szép fotóval meggyőzően foglalkozik a porlasztás okozta strukturális változásokkal, a vékonyrétegek analízisének lehetőségével. E hangsúly azért is öröndetes, mert az előző, a SIMS II. kötetből (Springer, 1979) az olvasó erről a területről csak hiányosan informálódhatott.

A kötet fontos témaköre a kvantitatívitas nagyon is időszerű témaköre, amelynek összefoglalóját G. H. Morrison írta. A közleményekben számos új megfontolást találhatunk a relatív érzékeny-

ségi faktorokra, új standardokra (pl. amorf fémek) a számítógépes spektrumkiértékelésre vonatkozóan.

A SIMS alkalmazásait két fejezet ismerteti, külön kiemelve a félvezetők (Si, CdSe, GeAS, InP) mélységi vizsgálatát (8 közlemény!), a vékonyrétegek, főleg az alumínium felületek analízisét. Teret kapott a SIMS talán legfiatalabb alkalmazási területe, a nem párolgó szerves vegyületek kimutatása is, amelynek összefoglalását A. Benninghoven adja meg. Az ionmikroszkópia viszont igen szűkrefogottan szerepel e kötetben.

Összefoglalva: a kötet — bár csupán egy nemzetközi konferencia anyaga — az előadók nagy száma és a jól kiválasztott meghívott előadók áttekintést adó munkája révén híven ükrözi a SIMS módszer jelenlegi állapotát, teljesítményét, és a fejlődés trendje (számítógépek használata, új ionforrások, szerves SIMS, kvantitatívítás) is körvonalazódik. Véleményük szerint a kötetet haszonnal forgathatják mindazok, akik a szilárd testek kémiai és fizikai összetételére vonatkozó feladatok megoldásával foglalkoznak.

Balthazárné Dr. Vass Katalin

C. Vidal, A. Pacault (editors):
Nonlinear Phenomena in Chemical Dynamics
Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
Proceedings of an International Conference, Bordeaux, September 7—11 (1981)

A mű a „Springer Series in Synergetics” c. sorozat 12 köteteként az Aachenben 1979-ben megtartott hasonló tárgykörű konferencia óta elért eredményeket foglalja össze. A főszínt nyílt reagáló, továbbá reakció-diffúzió rendszerek modellezésére és szimulációjára, továbbá a dinamikus rendszereket leíró matematikai módszerek elemzésére helyezi.

A kötet terjedelme 279 oldal, és 10 fejezetre oszlik. Az első fejezet (29 o., 4 cikk) a nemlineáris jelenségekkel, stacionárius és periodikus folyamatokkal, stabilitással és multistabilitással, gerjeszthetőséggel (Hodgkin—Huxley-modell), fluktuációkkal, Poincaré-ábrákkal, teljesítmény spektrumokkal és termokinetikus oszcillációkkal foglalkozik általános értelemben és definíciószerűen. A második fejezetben (74 o., 10 cikk) a dinamikai rendszereket leíró nemlineáris normál (térben homogén) és parciális (inhomogén) differenciálegyenletek elméletét, utóbbiak periodikus és nemperiodikus megoldásait, az attraktor és elágazás definícióját, utóbbiak kölcsönhatásait, a kritikus jelenségek kevert vektorterekkel történő leírhatóságát, a Belouszov—Zsabotinszkij, Briggs—Rauscher és egyéb autokatalitikus reakciók oszcillatorikus állapotait, hidrodinamikai, kémiai és mechanikai rendszerek kapcsolatát, a kaosz fogalmát, a turbulencia felé vezető átmeneti állapotokat (pl. periódus kettőzés, intermittencia) és végül a kísérleti szempontból igen lényeges ún. jól kevert evolúciós rendszereket ismerhetjük meg. A harmadik fejezet (24 o., 3 cikk) nemlineáris kémiai rendszerek hőmérséklet fluktuációival, a nem egyensúlyi fázisátalakulásoknál tapasztalható kritikus jelenségekkel és az elektrohidrodinamikai nematikus fázisátalakulások és nemlineáris zajok kapcsolatával foglalkozik. A negyedik fejezet tárgyát a kritikus jelenségek alkotják, nevezetesen kémiai reakciók kritikus tartományban tapasztalható lelassulása, a magképzés és ennek hanggyengítés útján történő mérése (12 o., 2 cikk). Az ötödik fejezet csatolt oszcilláló rendszereket ismert (16 o., 2 cikk), pl. miképpen lehetséges kémiai rezgéseket periodikus fényimpulzusokkal szinkronizálni, vagy csatolt rezgések segítségével kaosz generátorokat létrehozni. A hatodik fejezet (15 o., 3 cikk) kémiai rendszerek térbeli inhomogenitásait tárgyalja, elsősorban az ezeket leíró parciális differenciálegyenlet-rendszerek fázissingularitásainak, továbbá haladó és forgó hullámfront megoldásainak elemzése útján. A hetedik fejezetben (16 o., 2 cikk) a problémakör biokémiai szempontból érdekes jelenségei kaptak helyet, pl. oszcilláló enzimatis reakciók, Liesegang-gyűrűk, neuron oszcillációk, baktérium aggregációk stb. A nyolcadik fejezetet (33 o., 6 cikk) a multistabilitás és oszcilláció kapcsolataira és a különféle perturbációknak a rezgésekre gyakorolt hatására vonatkozó, főként kísérleti jellegű cikkeknek szentelték. A kilencedik fejezet (26 o., 3 cikk) a matematikai modellekkel foglalkozik, elsősorban az oregonátor egyenletek perturbatív és numerikus (Newton, Runge—Kutta) megoldásait, a rendszer Jacobi-mátrixának szingularitásait (kritikus pontok), utóbbi sajátértékeit tárgyalja és definiálja a sztochasztikus hálózati fogalmát. A konferencián bemutatott posztterek rövid tartalma ismertetését a tizedik fejezet tartalmazza a (31 o., 30 poszter). Ezek tartalmi vizsgálata jól rávilágít arra a jól ismert körülményre, hogy formailag azonos differenciálegyenlet-rendszerek segítségével lehetséges igen különböző fizikai, kémiai és biológiai rendszerek leírása és ennek folytán távolos jelenségcsoportok egy felsőbb vezérlő elv szerinti szintézise válik lehetővé. E vezérlő elv, a nem-linearitás univerzális jellege következtében a kémiai, hidro-, bio- és molekuláris dinamikai jelenségek, transzportfolyamatok új alapokra helyezett vizsgálatra nyílik mód. Engedtesék meg egy

szubjektív gondolat: már szűkebb környezetben is pl. az egykristályok növesztése (marangoni effektus) vagy a fág tarfoltképzés dinamikájának leírására, továbbá szűkebb munkaterületemen a vibrációs relaxáció koherens, ill. sztochasztikus voltának eldöntésére e módszerek kiválóan alkalmasnak tűnnek. A szerzőlistában megtalálhatjuk a témakör legmagasabb szintű művelőit, a kiadók mellett pl. J. L. Hudson, M. Feigenbaum, R. J. Field, H. Haken, B. Hess, E. Hopf, Kőrös Endre, R. M. Noyes, D. Ruelle, O. E. Rössler és mások személyében. (R. K.)

Landolt—Börnstein:

Numerical Data and Relationships in Science and Technology,

New Series, Group III. Volume 17

Semiconductors, subvol. 6, Physics of Group IV elements and III—V compounds

Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York — 1981

A félvezetők fizikai és technológiai tulajdonságainak felderítésére irányuló tudásanyag rendkívüli mértékű növekedése már régóta igényelte a mű megjelentetését, amely tulajdonképpen egy kb. 3000 oldal terjedelemben tervezett hatkötetes mű első része és az 1956-ban kiadott 110 oldal (6. kiadás, II/6 kötet) és az 1965-ben megjelent félvezetők technológiájával foglalkozó 100 oldal (6. kiadás, IV/2c kötet) terjedelmű köteteket hivatott pótolni.

A 642 oldal terjedelmű mű tulajdonképpen két részre oszlik. A bevezetőben (26. o.) rövid elméleti összefoglalást találhatunk az anyagok elektron (1) és rács (3) szerkezetéről, a töltéshordozók mozgékonyaságáról (4). Ezt a fenti anyagok kísérleti tanulmányozását célzó transzport (4), optikai (5) és egyéb (6) mérések rövid összefoglalása követi, majd pedig a szennyezőkkel, ill. rácshibákkal kapcsolatosan a sekély és mély hibaállapotok, a kötött excitonok és a lokalizált módusok kerülnek terítékre (2). A fejezetet a felhasznált szimbólumok ismertetése zárja.

Az érdemi rész két alrészre oszlik. Az elsőben a IV oszlop (5 anyag, 207 o.) elemei és egymás közötti vegyületei fizikai tulajdonságaira, míg a másodikban (15 anyag, 345 o.) a III—V vegyületekre vonatkozó adatokat találhatjuk. A rendszerezés hierarchiája háromkarakteres, az első az alrészre, a második az illető anyagra (itt a vezérelv a periódusos rendszerben elfoglalt hely), a harmadik pedig a mért fizikai tulajdonságra vagy irodalomjegyzékre vonatkozik. (Ezek a szövegben található zárójelbe tett számok.) Az egyes anyagokkal foglalkozó fejezetek végén irodalmi referenciagyűjtemények kaptak helyet. (7). Összesen 20 elem, ill. vegyület adatai találhatók meg a műben, pl. C-SiC az első, BN-InS a második alrészben. Az alfejezetek végén szerepelnek azonban pl. $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -re (8 o.), ill. $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ -ra vonatkozó (29 anyag 56 o.) adatok is. Szilícium esetében 102 táblázatot, 173 ábrát és 480 irodalmi hivatkozást (17 db 1980-ból, 1 db 1981-ből), bórnitrid esetében 30 táblázatot, 22 ábrát és 50 hivatkozást (5 db 1979-ből) találunk. A táblázatok és ábrák a sorozatra jellemző műgonddal készültek és a szokványos, a fázisdiagram, sávszerkezet és állapotsűrűség ábrák mellett pl. a mágneses visszaverődési spektrumokat, a Grüneisen állandó hőmérsékletfüggését stb. ábrázoló különlegesebb ábrákat is találhatunk közöttük.

Úgy gondolom, elegendő egy pillantást vetni a mű címére, hogy tudatára ébredjünk annak a fontosságnak, amelyet e mű képvisel. Továbbá közhely lenne az e csoportba tartozó anyagok technikai és tudományos jelentőségét hangsúlyozni, és még kifejezettebb mértékben pedig azt, hogy mennyire fontos és hön áhított az ezekre az anyagokra vonatkozó bármely új adat közlése, vagy a meglevő adatok rendszerezése. Régi hiányt pótolva, nem csupán szűkebb alkalmazási területén, hanem a szilárdtestfizika és anyagtudományok egyéb területein működő szakemberek is fontos kutatási segédeszközként üdvözölhetik a művet. (R. K.)

**G. Marx (ed.): Nuclear Physics. Nuclear Power
GIREP Seminar on the Teaching of Physics in Schools
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981**

GIREP = Groupe Internationale de Recherche sur l'Enseignement de la Physique. A GIREP-szeminárium helye Balatonfüred, ideje 1981. szept. 6—12.

A könyv 632 oldalas. Van benne pl. 16 terjedelmű írás, de 1—2 oldalas is. Van benne üdvözlő beszédbé beépített sok-sok gondolat, van megrázó, szakszerű élménybeszámoló 1945. aug. 6-áról, Hirosima pusztulásáról, P. L. Kapitza cikke a plazmáról és ellenőrzött termionukleáris reakcióról 13 oldalon. Részletes beszámolót olvashatunk az atomenergia tervezett felhasználási ütemére vonat-

kozóan, kitérve pontos statisztikai adatokra az atomerőművek várható környezetszennyezésére és veszélyére; ez utóbbit szembeállítva a különböző szerencsétlenségek okozta elhalálozások adataival.

Mindez igen alkalmas arra, hogy amikor a nukleáris háború rémségeit ismertetve harcolunk a békéért, harcoljunk az atomerőművekkel kapcsolatban fel-fellépő tömeghisztéria ellen; rámutassunk, hogy az emberi fejlődés létalapja az atomenergia békés felhasználása.

A könyv harmadik részének címe: Nuclear Education.

Kell-e?

Képzeljük el (179. oldal), hogy Földünk egy vékony felszíni réteg kivételével tiszta olaj. Az olajnak, mint energiahordozónak jelenlegi felhasználásának exponenciális növekedésére gondolva, ez az $6,8 \cdot 10^{21}$ hordó olaj csak 342 évig lenne elegendő.

Van-e kellő óraszám az atommag tanításához? Természetesen nincs. — Kettős a probléma: Van-e ez az anyag olyan fontos, hogy megtanítsuk? Olyan ez az anyag, hogy mindenkinek megtanítható? P. Thomsen (Koppenhága), a GIREP past president-je a konferencián így felelt erre a két kérdésre:

A fizika taníthatóságának célkitűzése az utolsó évtizedben nagyot változott. 30 évvel ezelőtt a tanuló egy sereg fogalom és törvény ismeretét tanították, melyeket mindennapi élete szempontjából fontosnak tartottak. Az ötven-hatvanas évek reformmozgalmai arra irányultak, hogy a tanulóval megértessék, hogyan jutottunk el a jelenlegi fizikai ismeretekhez. Fontos feladattá vált betekintést adni a tudományos módszerbe, s ezért lényeges lett a tanuló laboratóriumi munkája. A mai cél a tudományosan képzett ember, aki tudja, mi az a tudományos attitűd és módszer, s tudatában van a tudomány társadalmi fontosságának. Gondoljuk meg, hogy ezen elképzelés szerint mekkora fegyver az atommag oktatásának fontosságát hangoztatók kezében az a tény, hogy a népek részt vesznek az energia vitában.

A második, a taníthatóság kérdésére nehezebb az igenlő válasz a vegyes képességű és érdeklődésű tanulók együttes oktatása miatt. Emiatt is szűkre kell szabni ezt az anyagrészt, de annál magasabbra kell emelni oktatásának pedagógiai nivóját.

Tehát mit és hogyan?

Erre igen sokféle, szellemes, érdekes feleletet kapunk a könyv 155—612 lapjain.

Csak gratulálni lehet a konferencia szervezőknek, hogy ilyen értékes nemzetközi és hazai gárdától ilyen érdekes gondolatokat gyűjtöttek össze. — A könyv angol nyelvű. Sajnos nem áll fent, hogy valamennyi fizika tanárunk folyékonyan olvas angolul. Úgy vélem, hogy így külföldön megérdemelt nagy sikert arathat, de hazai vonatkozásban nem fogja meghozni azokat az eredményeket, amelyeket meghozhatna nálunk is.

T. Gy.

I. Lindgren és J. Morrison: Atomic Many-Body Theory Springer-Verlag, 1981.

A könyv a Springer Kiadó Kémiai Fizika sorozatának (Springer Sciences in Chemical Physics) 13. köteteként látott napvilágot. A kiadó neve és a sorozat címe önmagában is elegendő a magas színvonal jellemzésére, ezt az alábbiakban következő rövid tartalmi áttekintés csak még meggyőzőbbé teszi.

A könyv két jól elkülönülő részből áll. Az első rész (1—8. fejezet) tartalmazza a tulajdonképpeni atomfizikai ismereteket középhaladó szinten. Ez a rész önmagában is használható tankönyvként a felsőbb éves fizikus és vegyész hallgatók oktatásában, illetve alkalmas arra, hogy a nem teljesen ezen a szakterületen dolgozó kutatók számára a témakört részleteiben is megismertesse. Rövid bevezető után a következő három fejezet az impulzusmomentummal és a tenzoroperátorokkal foglalkozik. Igen egységesen, gráfok segítségével tárgyalja a különböző csatolásokat és a megfelelő csatolási együtthatók (pl. 3_j szimbólumok stb.) kiszámítását. A következő fejezetek a független részecske modellt, a centrális erőter modellt és a Hartree-Fock elméletet ismertetik. Az első rész zárófejezete pedig a sokelektron hullámfüggvény általános tulajdonságairól szól, itt találkozunk az állapotok osztályozásának általános kérdéseivel is.

A könyv második része (9—15. fejezet) tulajdonképpen általános soktestproblémával foglalkozik, és nagymértékben független az első résztől, legalábbis annyiban, hogy nemcsak atomi, hanem egyéb kölcsönható sokfermionos rendszerekre (pl. molekulákra, atommagokra, szilárd testekre) is alkalmazható elméletet fejt ki.

A 9. fejezetben általános perturbációszámítási alapokat fejtenek ki a szerzők, alkalmazásként pedig a következő fejezetben betöltött héjak elsőrendű korrekcióit vizsgálják. Eközben az egyes perturbációs korrekciók grafikus reprezentálására — a Feynman diagramok analógiájára bevezetik az ún. Goldstone-diagramokat. A következő fejezet térelméleti módszerek segítségével magasabb rendű

folyamatokra is bevezeti a gráfokat. A könyv további fejezetei az így bevezetett gráftechnika alkalmazásai. Először betöltött héjú rendszereket, utána betöltetlen héjú rendszereket tárgyal a könyv, ezután pedig külön fejezet foglalkozik a hiperfinom kölcsönhatással. Az utolsó fejezet a gráftechnika további általánosítását tartalmazza egy, kettő ... részecskére, amikor az egyszeres, kétszeres ..., stb. gerjesztéseket a perturbációsszámítás összes rendjében figyelembe vesszük. Különösen részletesen tárgyalja a könyv a párkorrelációs függvényt. Végül betöltetlen héjakra ismerteti az ún. kölcsönható klaszter-módszert. Az ismertetett általános módszereket mindig konkrét atomi példákra történő alkalmazások egészítik ki. Igen részletes összehasonlítások szerepelnek a különböző pontosságú elméleti közelítések és a kísérleti adatok között, és ez mindig jól mutatja az egyes módszerek hatékonyságát.

A könyvet tulajdonképpen egyetlen komolyabb kritika illetheti: alig esik szó benne variációs módszerekről, pedig ezek atomfizikai alkalmazási köre majdnem ugyanolyan széles, mint az ismertetett perturbációs módszereké. Ez valószínűleg a szerzőknek azon meggyőződéséből fakad, hogy az általuk ismertetett perturbációs módszerek hatékonyabbak, mint a variációs eljárások.

Összefoglalásként megállapíthatjuk, hogy igen színvonalas művet tartunk a kezünkben, amely valóban eleget tesz a saját maga által felállított célkitűzésnek: igen sok részterületen valóban áthidalja az oktatás és a kurrens irodalom közötti hézagot. Számos terület szakemberei — fizikusok, vegyészek, mérnökök, biológusok — forgathatják érdeklődéssel lapjait, persze elsősorban azok, akik valamilyen formában spektroszkópiai területen dolgoznak. A könyv egyes részei — elsősorban az első része — alkalmas felsőfokú oktatási tankönyvként történő felhasználásra is.

Bergou János

A KÁOSZ (véletlenszerű jelenségek nemlineáris rendszerekben)

Szépfalussy Péter és Tél Tamás (szerkesztők):

Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982

Szépfalussy Péter és az MTA Matematikai és Fizikai Tudományok Osztályának Statisztikus Fizikai Albizottsága bölcs előrelátással ismerte fel azt a tendenciát, hogy a nemlineáris jelenségek vizsgálata korunk tudományos fejlődésének egyik sarkalatos irányzata. Ennek a felismerésnek a helyességét megerősítik azok a gondolatok is, amelyeket a „Helyzetfelmérés és prognózis a „Szilárdtestek kutatása” országos főirányban 2000-ig” című, gondos munkával összeállított előterjesztésben olvashatunk és amelyeket itt röviden összefoglalva idézünk:

„Az elméleti szilárdtest-fizikai kutatásokban az eddig elért sikerek nagyrészt azon alapultak, hogy a rendkívül bonyolult soktest-problémái feladatot két alapvető feltevéssel leegyszerűsítették. Ideális kristályt tételezve fel, a szabályos periodicitás kihasználása lényeges egyszerűsítéseket tett lehetővé, és a mozgásegyenletek linearizálása igen gyakran egyszerűen megoldható feladatokhoz vezetett.

Természetesen már régóta vizsgálták a szabályos periodicitástól való eltérés (rácshibák, szennyezés, stb.) hatását, és tanulmányozták a lineáris közelítésen túlmenő korrekciókat is, de az utóbbi években a szilárdtest-fizikai vizsgálatokban egyre nagyobb helyet foglalnak el a kristálytanilag, vagy egyéb módon rendezetlen rendszerek (amorf, üvegszerű anyagok; polimér térhálók; perkolációs problémák) és az erősen nemlineáris problémák (kritikus jelenségek; egyensúlytól távoli instabilitások; topologikus gerjesztések).

A nemlineáris jelenségek és a rendezetlen anyagok kutatásának fellendülését hosszabb távú trendnek kell tekintenünk, mivel a fizikai jelenségek nagy része nemlineáris folyamatok eredménye (és valamilyen jellegű rendezetlenség mindig jelen van); matematikailag igen bonyolult problémákról van szó, tehát nem várható gyors megoldás, viszont az esetleges „áttörések” alkalmazási területe rendkívül tág (kémiai és biológiai rendszerek, stb.).”

„A termodinamikai egyensúlyban lejátszódó jelenségek után az egyensúlytól távoli jelenségek megértése várható. Konkrétabban a nem egyensúlyi rendszerekben kialakuló instabilitások vizsgálataira gondolunk (kristálynövekedés, képlékeny alakváltozások instabilitásai, kémiai reakciók, morfogenezis, evolúciós modellek). Az instabilitások, illetve a rendezett állapotból egy esetleges kaotikus állapotba való átmenet megértése rendkívül széles körű alkalmazásra találhat más területeken is és fontos része a nemlineáris jelenségekkel kapcsolatos problémakörnek.”

Mindezek a megállapítások egyértelműen alátámasztják az ismertetendő könyvben tárgyalt problémákör aktualitását, és őszinte elismerés illeti a tárgykörben 1982 januárjában rendezett téli iskola szervezőit a hazai kutatások beindulását elősegítő munkájukért. A lelkes kollektívának mulhatatlan érdeme egyben, hogy az iskola anyagát könyv formájában is hozzáférhetővé tette. Elismerés illeti az Akadémiai Kiadót, hogy a kötet már 1982 őszén megjelenhetett.

Ez a könyv lehetőséget nyújt arra, hogy a kutatók avatott szerzők tollából igen alaposan és részletesen megismerhessék ezt az igen aktuális és a felfutás periódusában levő problémakört, amelynek a jelentőségét nehéz túlbecsülni. A hazai kutatók széles köre — fizikusok, matematikusok, kémikusok, csillagászok, mérnökök és biológusok számára könnyíti meg az alapok megismerését és elsajátítását, és egyben elvezeti az érdeklődő olvasót a legújabb, talán még minden vonatkozásban teljesen ki sem forrott eredményekig. A bevezető tanulmány tömören, de jól átgondoltan és jól érthetően foglalja össze mindazt, amit a kaosz kialakulásáról és a kaotikus állapotokról tudunk. Ez a bevezető alapozza meg a további tanulmányokat, amelyek keretében a kaotikus állapot kialakulását tanulmányozzák különböző fizikai, kémiai és csillagászati rendszerekben. A problémakör szerteágazó voltát, számos tudományággal való kapcsolatát, jól mutatja a szerzők széles köre: fizikusokat, matematikusokat, csillagászokat és mérnököket egyaránt megtalálhatunk a szerzők sorában.

Ezt az igen tartalmas és egyben szép kiállítású könyvet ajánlhatjuk minden kutatónak: fizikusnak, matematikusnak, csillagásznak, kémikusnak és mérnöknek, akik meg óhajtanak ismerkedni a jelenleg még in statu nascendi levő, de igen gyorsan fejlődő tudományággal, amelynek az eredményei igen jelentőseké válnak nemcsak az alapkutatások, a világ jobb megismerése szempontjából, hanem nagy mértékben ki fognak hatni a műszaki fejlődésre és a gyakorlati életre is. Úgy érzem, hogy a könyvben vizsgált problémák tanulmányozása a biológusok és a társadalomtudományok művelői számára is hasznosak.

S. T.

Jagdish MEHRA — Helmuth RECHENBERG:
The Historical Development of Quantum Theory
Vol 1. Part 1—2. The Quantum Theory of Planck, Einstein,
Bohr and Sommerfeld: Its Foundation and the Rise of Its Difficulties, 1900—1925
Springer-Verlag, New York — Heidelberg — Berlin, 1982

A szerzők hatalmas vállalkozásából, az egyelőre kilenc kötetre tervezett kvantummechanikai történeti körképből íme az első kötet, melynek anyaga máris két könyvben fér csak el. Hogyan kezdődik az áttekintés, ami e kötet tárgya? Kvantumok és molekulák (a kvantumok jelenségek feltárása — a hőmérsékleti sugárzás és a fájóprobléma — Planck kvantumelméletének a térhódítása) — Az atomszerkezet Bohr—Sommerfeld-féle kvantumelmélete (az atomi és molekulaszinképek értelmezése a kvantumelmélettel a Bohr-modell útján) — A göttingai Bohr-fesztivál (a periódusos rendszer elméletének kidolgozása; Courant, Born, Franck és a göttingai hagyományok) — Az atommodellek mechanikai és spektroszkópiái elégtelenségei (W. Pauli és a He-atom, a Stern—Gerlach-kísérlet, az anomális Zeeman-effektus) — A sugárzáselmélet problémái (a fénykvantum hipotézis bizonyítékai a Bohr—Kramers—Slater-féle sugárzáselmélet — a Bose-statisztika a fotonokra és kiterjesztése a gázokra — A fázishullámok és anyaghullámok — A problémakör állása 1925-ben) — Új módszerek, új koncepciók az atomelméletben a (diszperzióelmélet — atomszerkezet és a lezárt elektronhéj — Pauli-elve — az elektronspin felfedezése).

Az első kötetből már megítélhető, hogy mekkora vállalkozásról van szó. Szerzők erről a diszciplínáról, kibontakozásáról nem írhatnak rövid történeti tanulmányt. Ezt már nem egy illusztris szerző megtette. Most, a sajátos célok és eszközök mást kívánnak. Mik a sajátos célok? Bemutatni a kvantumelmélet mára kialakult helyéről visszatekintve ennek az általános szerepkörnek a kialakulását. Nem kell ugyanis bizonygatni, hogy a kvantumelmélet minden fizikai diszciplínából táplálkozott és — a relativitáselmélettel karöltve — méltán lett fő motorja a modern fizika forradalmának, miközben minden fizikai diszciplínába behatolt és elhivatottnak mutatkozott egyfajta általános szintézis szerepének ellátására, mely a klasszikus elméleteket speciális esetként tartalmazza. Ugyanakkor egyre újabb területeken bizonyult klasszikus őseivel szemben egyedülállóan hivatottnak. E szerepkör kiépülése hosszú folyamat volt, ami a fizika térképén a szélrőzsa minden irányából eredő áramlatokat egyesítette magába. E folyamat eseményeit, küzdelmeit és eredményeit epikus műfaj, „családrégény” vagy még inkább egy eposz mutathatja be leginkább. Tényleg az eposz. Mert kell a motivációt ismerni (invokáció), kell a hősök felvonultatása és a fegyverek leírása (enumeráció), kell a „deus ex machina” (az események alakulását befolyásoló váratlan felismerések, a hatáskvantum, a fotonhipotézis, a de Broglie-hullám, a sajátérték probléma, a kizárási elv, stb.) mozgató erőinek bemutatása, kellenek az epizódok, a nagy barátságok segítette együttműködések, a hősök és az elbeszélő személyes érdekeltiségének, érzelmi ráhangoltságának érzékeltetése.

Korszerű-e egy ilyen vállalkozás? Elérkezett-e már erre az idő? Vagy tán már el is múlt a jó pillanat? Azt hisszük, elérkezett, tán nem is sokkal több ideje, mint egy-két évtizede. És még éppen nem szaladt el a jó pillanat adta alkalom. Úgy hisszük, éppen egy-két évtizedes „kamasz”-korú a kvantumelméletnek az a vonása, hogy nem kell többé hadakoznia a (klasszikus szemlélet abszolutiz-

musából eredő) váddal, hogy nem szemléletes. A számítástechnika — ami nem kis kvantummechanikai szellemi tőkét kamatoztat az elektronika szilárdtestfizikai eszközeinek felhasználásakor — a korábban reménytelenül hosszadalmas számítások gyors elvégzésével lehetővé tette új látnivalók kirajzolását, megteremtette az „új szemléletesség” alapjait. És nem utolsó sorban: több új generáció szokta már meg az új szemléletet. A kvantummechanika másrészt épp egy-két évtizede indított el új ágakat a szilárdtestfizika, a kémia, a biológia területén. Ezeknek az új tényeknek az ismeretében még nem született visszatekintő összegzés a kvantumelmélet történetéről.

S hogy nem túl késő-e ez a próbálkozás? Éppen nem, sőt valószínűen a legutolsó lehetőség. Planck, Einstein, Bohr, Born, Pauli, Heisenberg már elhunyt ugyan, de még élnek néhányan a küzdő hősök közül, hogy csak Dirac és Wigner nevét említsük, akiknek személyes emlékei még hozzáférhetőek. És élnek még számosan a Nagy Öregek Első (kézből) Nevelt Tanítványai a küzdelem és a diadal tanúi és részesei, a közvetlen szellemi örökösök. Ezek közé tartozik Jagdish Mehra, aki Paulinak volt tanítványa, és mint ilyen részese lehetett az Első Generáció kontaktusának. De ilyen Helmut Reichenberg is, aki Heisenberg időben utolsó doktorandusza volt. Egyben válaszoltunk egy olyan kérdésre is, hogy mekkora lehet a szerzők személyes kompetenciája — nemcsak tudományos kvalitása. Ez utóbbról már Jagdish Mehra eddig publikált könyvei is fenséges garanciát kínálnának.

Miért érdekes ma egy ekkora körkép a kvantumelméleten kívülállók számára? Mert e gazdag és hősi korszak küzdelmei és hatáskörüik messze túlnőtt a fizikán. Mert hőseinek életét ez a körülmény társadalmi és politikai téren különösen exponáltta tette, mert ezekbe az életekbe is beleszólt a két világháború, mert ezeket keresztettk a sorsdöntő politikai áramlatok. Mert ebben az időszakban — épp a kvantummechanikával kapcsolatosan megnőtt hatékonyság eredményeként — lépett a fizika mint ipari és mint katonai tényező a nagyhatalmak sorába. Mert mindennapi életünk részesei és formálói lettek a kvantumelmélet eredményeinek gyakorlati és elvi vonatkozásai a tranzistoros zsebrádiótól és minikomputertől a DNS makromolekulájáig és a világnézet átforgatásáig.

Felmerülhet a kérdés, hogy mit látunk magunkról mi magyarok, amikor e körképre nézünk. Hiszen hitünk szerint a magyarok is kivették részüket a küzdelemből. Talán vigasztaló választ ad a kérdésre e felsorolás. A kötetben a következő magyar nevekre találtunk hivatkozást: Bolyai János, Mrs. Dirac (Wigner Margit, a legendás „Mancie”), Gábor Dénes, Haar Alfréd, Hevesy György, Kármán Tódor, Lénárd Fülöp, Neumann János, Polányi Mihály, Szily Kálmán, Teller Ede, Wigner Jenő és Zsigmondy Richárd. A felsorolás is elárulja, hogy a szerzők nemcsak a tudományos fórumokon zajló küzdelmekről szólnak, hanem a „folyosói szimpozionok” emlékeit csak úgy összegyűjtötték, mint a magánjellegűeket.

Valóban homéroszi feladat: a kvantumelmélet szimbolikus aranygyapjának keresésére indult (?), küldött (?) vándorok kalandjainak, sorsának, sikereinek, kudarcainak olyan leírása, amely nemcsak rögzíti a tényeket mielőtt elszürkülnének vagy szertefoszlának az emlékek, hanem a küzdés poézisét is megmutatja. Erre pedig amúgy is nagy szükség van — s hogy ez épp a kvantumelmélet kapcsán látható, csak egy további jótétemény.

Kíváncsian várjuk a folytatást, s közben érdemes elgondolkodni azon, vajon nem lehetne egyszer egy ilyen komplex művet magyarul is az Olvasó kezébe adni.

Abonyi Iván

**L. Brekhovskikh — Yu. Lysanov: Fundamentals of Ocean Acoustics
Springer Series in Electrophysics 8.
Springer Verlag — Berlin — Heidelberg — New York, 1982**

Közismert dolog, hogy a szovjetunióbeli kollégák között számos kitűnő elméleti akusztikus dolgozik. A szerzőpáros is ezek közé tartozik. Az elméleti fölkészültséget azonban rendszerint valamilyen nagyonis gyakorlati cél érdekében hasznosítják. Így van ez a jelen munka esetében is. Brekhovskikh akadémikusról tudjuk, hogy jó negyedszázada járja a Csendes- és az Indiai-óceánt, valamint az arktikus vizeket az akadémia kutatóhajójával, és gyűjti a kísérleti adatokat az óceánok különös akusztikai jelenségeiről. Eközben ő és számos munkatársa sok tudományos dolgozattal gyarapította a nemzetközi irodalmat. Első, 1957-ben megjelent orosz nyelvű könyvét követte 1960-ban, majd második kiadásában 1980-ban az Academic Press Kiadónál az angol nyelvű változat „Waves in Layered Media” címen.

Az óceáni akusztika eléggé újkeletű tudományág. A sonar bevezetése óta lehet kiterjedt kutatásáról beszélni. A kutatás fizikai, biológiai, de hadviselési szempontból is rendkívül fontos. A víz alatti zajszínek 0,1 Hz és 100 kHz között helyezkedik el.

Infrahang frekvenciákon (0,1—10 Hz) a fő zajforrás a földrengés, a víz alatti tűzhányókitörés, a vihar, légi vagy víz alatti örvényforgatagok és bizonyos nemlineáris felületi kölcsönhatások. Az

akusztikai kis frekvenciákon (50—300 Hz) a fő zajforrás a hajóközlekedés. Csak az Atlanti-óceán északi részén egyidejűleg ezernél is több hajó van egyszerre vizen. A hangcsillapítás ezeken a frekvenciákon még elég kicsi, amellet a víz alatti hangvezető csatornában a csaknem síkhullámszerű hangterjedés miatt a zaj több ezer km távolságban is intenzíven hat, tehát az egész óceánvilágban ez az alapterminő zaj igen magas, 60—80 dB/Hz teljesítménysűrűségű. A következő tartomány 0,5—50 kHz között helyezkedik el. Ennek a szinképi résznek többféle forrása van, elsősorban a szélnyomás, a hullámtörés, a kavitációs jelenségek stb. Végül 100 kHz fölött a termikus zörejek uralkodnak, intenzitás-szintjük azonban már csak -20 dB körüli (10^{-12} W/m²-re vonatkoztatva).

A biológiai zörejek ezekhez a környezeti zajokhoz képest frekvenciában szelektívebbek és időben is elhatároltak. Viszont igencsak intenzívek. Pontos földterítésük, csálhatatlan észlelésük többek közt azért is fontos, mert néha összetéveszthetők a hajók keltette zörejekkel. Egy ilyen tévedés az atomhajtású és atomrakétákkal ellátott tengeralattjárók világában könnyen végzetes lehet...

A kérdés jelentőségét egyetlen adattal kívánjuk érzékeltetni. A normális tengeralatti hangterjedés csillapítási együtthatója 100 Hz frekvenciára mintegy 10^{-3} dB/km, ami annyit jelent, hogy az eredeti jelintenzitás síkhullámú terjedés esetén 10 000 km távolságban csökkenne a tízedrészére. Ámde 100 Hz frekvencián nem tudunk síkhullámokat (de még hengereseket sem) előállítani, vagyis a gömbhullám-terjedés miatt az előbbi csökkenés már 100 m távolságban bekövetkezik. Nyalábosítható — például 100 kHz — frekvencián viszont az elnyelés 10 dB/km, tehát szintén kis távolságra hat el a jel. A hangvezető csatornák azonban lehetővé teszik legalább a hengeres hullámterjedést (de néha még a közel síkhullámút is), vagyis ezek segítségével akár a robbanási hangok mély összetevőit is sokezer kilométeres távolságban észlelni lehet. A vízalatti jeladás és megfigyelés tehát nagy gyakorlati jelentőségre tett szert.

Ezért van az, hogy az akusztika teljes kutatási területén belül a tengeralatti kutatások iránti érdeklődés közvetlenül az emberi akusztika (hallás-beszéd) után következik.

Brechovszkíchék nemzetközi tudományos eredményei készítették a Springer nemzetközi könyvkiadót egy általános óceáni akusztika könyv megjelentetésére a szerzők tollából. Mint a szerzők az előszóban megírják, alapjában véve az óceáni hangterjedés, -visszaverődés és -törés determinisztikus elméletét foglalják össze, azaz az óceáni hangvezető csatornákat, a hangárnyékolat területeket, a kausztikus felületeket, a sekélyvízi hangterjedést, továbbá a sík- és gömbhullámok felszíni és fennkről való visszaverődéseit tárgyalják mindkét módszerrel, azaz a hangsugár és a hullámhalmok módszerével. Emellett nagy súlyt helyeznek a sztochasztikus elmélet tárgyalására is, vagyis olyan feladatok matematikai megoldására, mint a hangszóródás a hullámos vízfelületről, visszaverődés statisztikus akadályokról, továbbá hangterjedés a hangvezető csatornában, ha abban áramlás is van stb.

Mindez csak elméleti jelentőségűnek látszana a kísérleti eredmények és gyakorlati alkalmazások ismerete nélkül, viszont értelmetlen volna a tiszta elméleti menetet ezekkel az adalékokkal minduntalan megszakítani. Ezért a szerzők azt a módszert választották, hogy egy első fejezetben összefoglalták mindazt a kísérleti eredményt, amit a könyv megjelenésének időszakáig ezen a területen világszerte elértek. Ezzel megoldották az esetleges későbbi kiadások örök problémáját. Csak az első fejezet anyaga változik évről-évre, a könyv többi — elméleti — részét legfőljebb 10 évenként kell megújítani.

A könyv egyébként 11 fejezetre tagozódik. A már említett kísérleti fejezet után az óceáni hangter, majd a visszaverődések fejezetei következnek (külön síkhullámokra és külön pontforrásra). A sekélyvízi terjedés után három fejezetben a legsajátosabb óceáni akusztikai problémák, a hangvezető csatornák tárgyalása folyik. Ezután a hullámos tengerfelületről való szóródás következik. A statisztikus inhomogénitások hatása, majd az utolsó fejezetben gázbuborékokon való hangszóródás és elnyelődés folyamatai kerülnek tárgyalásra. Részletes utalási jegyzék és tárgymutató egészíti ki a kötetet.

Bár hazánkban vízalatti kutatások nem folynak, a könyv — különösen az elméleti akusztikusok körében — érdeklődésre tarthat számot. Ugyanis sok olyan rész van a könyvben, ami általában a folyadékokban való hangterjedés fizikáját taglalja és aminek a mérés technikában és technológiában lehet hasznát venni. Megemlíthetjük például, hogy az atomerőművek vízhűtésének állandó ellenőrzésében számos itt tárgyalt elméleti megfontolás hasznosítható. A könyv elolvasását tehát nemcsak akusztikusoknak és elméleti fizikusoknak, hanem atomtechnikusoknak is ajánljuk.

T. T.

Landolt—Börnstein, Group III., 15a
Metals: Electronic transport phenomena
Springer-Verlag, — Berlin — Heidelberg — New York, 1982

A kötet három részből áll:

I. rész: J. Bass (Egyesült Államok): Tiszta fémek és híg ötvözetek elektromos ellenállása (288 oldal).

Részletes táblázatokat ad a tiszta fémek ellenállására 273,2 K hőmérsékleten, összefoglalja a fellelhető irodalmi adatokat az ellenállás hőmérsékletfüggésére 10—15 K és az adott fém olvadáspontja között, valamint az abszolút nulla hőmérséklet közelében. Az adatok teljességét jól jellemzi az, hogy csak három fém, az aktínium, a francium és a rádium esetében nem tud ellenállási értékeket szolgáltatni.

Ha a próbadarabok mérete összemérhetővé válik az elektronok átlagos szabad úthosszával az adott anyagban, a mérendő test fajlagos ellenállása megnő. Ilyen jelenségekkel, így a Matthiessen szabálytól való méretfüggő eltéréssel stb. egész fejezet foglalkozik ebben a részben.

Jelentős súllyal szerepel az I. részben a híg ötvözetek ellenállása is. A fellelhető adatok közlése mellett elemzi a Linde-törvény adta lehetőségeket, a Matthiessen-szabály alkalmazhatóságát és röviden ismerteti a Bloch—Grüneisen ellenállásfüggvényt.

II. rész. K. H. Fischer (NSZK): Kondo és spinfluktuációs rendszerek, spinüvegek. (88. oldal) Rövid bevezetés után, amelyben a Kondo effektusról, a Kondo hőmérsékletről, a spinfluktuációs jelenségekről és a spinüvegekről ad áttekintést, összegzi azokat az adatokat, amelyek a kimért Kondó és spin fluktuációs rendszerekről, ill. a spinüvegekről az irodalomban fellelhetők. Az adatok felhasználását jelentősen megkönnyíti, hogy az adatokra illesztett görbéket is közöl.

III. rész. J. Bass: Tiszta fémek és híg ötvözetek termofeszültsége (12. oldal).

A rész címénél szűkebb témát dolgoz fel, és pedig tiszta fémek és híg ötvözetek termofeszültségével kapcsolatos méreteffektusokat tárgyalja. A termofeszültség egyéb adata ugyanennek a kötetnek a *b* alkötetében lesznek megtalálhatók.

A sorozat többi kötetéhez hasonlóan valamennyi adatot bibliográfia támaszt alá, sőt felhívja a figyelmet egyes irodalmi hivatkozásokban található hibákra is.

J. J.

Bisztray-Balku Sándor, Bozóky László, Koblinger László:
A sugárvédelem fejlődése Magyarországon
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982

A sugárvédelem ma az egész emberiséget érintő kérdés. Komplex problémáról van szó, amellyel kapcsolatban hazánk említésre méltó, egyes területeken úttörő szerepet töltött be a múltban, és több vonatkozásokban elől jár ma is. Helyesléssel kell üdvözlönnünk a szerzői hármás kezdeményezését, amely felhasználva a régmúlt időkre vonatkozó, még fellelhető dokumentumokat és a kortársaktól eredő információkat, bemutatja egy, kb. 80 évre terjedő korszak hazai fejlődését. Az érdekes és tanulmányos visszapiantás aktualitását fokozza az a körülmény, hogy nemrég jelent meg az ionizáló sugárzások elleni védekezés kérdéseivel foglalkozó első törvényünk, az ún. „Atomtörvény 1980”, és ugyancsak a közelmúltban volt a sugárvédelem egzakt megalapozását lehetővé tevő standard dozimetria hazai bevezetésének 50 éves évfordulója.

A könyv I. részében, csaknem 90 oldal terjedelemben BISZTRAY-BALKU SÁNDOR a *röntgensugárzás* elleni védekezés hazai történetével foglalkozik. Ismertetéséből értesülhetünk a gyors hazai reagálásról, amely RÖNTGEN felfedezését követte. KLUPATHY JENŐ előadása még RÖNTGEN első nyilvános előadását is megelőzte. Ugyancsak igen korán, 1896 elején készített KISS KÁROLY röntgenkészüléket. Az érdekességekhez tartozik az is, hogy az első sugárvédett röntgencsőburkolatot egy hamburgi cég a magyar MARKÓ DEZSŐ 1925-ben közzétett szabadalma alapján gyártotta. Értesülünk a könyvrészletből a későbbi hazai újítók külföldi kiállításokon elért sikereiről, közöttük az ún. Ratkóczy-kabinról, amely 1931-ben Párizsban díjat is nyert. A sugárvédelemre eleinte nem helyeztek súlyt, de az első tapasztalatok után RATKÓCZY NÁNDOR kezdeményezése a 20-as években nemzetközileg is az elsők között volt: a sugárvédelemmel kapcsolatban kidolgozott irányelveit 1928-ban juttatta el a Népszövetséghez. Sajnálatos viszont, hogy a korai törekvések ellenére az első sugárvédelmi szabvány hazánkban mégis csak az 50-es évek elején született meg.

Az ionizáló sugárzások, következésképp a sugárvédelem történetében is új korszakot jelentett az 1942. év, amikor működésbe lépett az Egyesült Államokban az első atomreaktor. Az új lehetőségek a világháborús események következtében hazánkban sok év késéssel jelentkeztek, és a korszakváltás időpontját 1954-ben jelölhetjük meg, amikor hazánkba érkezett az első mesterséges radioaktív izo-

tópszállítmány a Szovjetunióból. Az 50-es évek első fele azonban a röntgensugárzás vonatkozásában is új korszakot jelent hazánkban. Erre az időszakra esik ui. a röntgenipar átszervezése, több orvosi intézmény bevonása a röntgen-munkahelyek sugárvédelmének ellenőrzésébe, a szabványok és óvórendszabályok betartásának ellenőrzése stb. A könyvrészlet végülis az utolsó évtized szisztematikus, körültekintő munkájának eredményeivel és a jelen helyzettel foglalkozik. A szerző információi igen tanulságosak napjaink gyakorlata számára is.

A könyv II. része kb. 90 oldal terjedelemben a *radioaktív anyagok és a gyorsítók* orvosi felhasználásánál felmerült sugárvédelmi kérdésekkel, ezek hazai fejlődésével foglalkozik. Szerzője BOZÓKY LÁSZLÓ, a sugárvédelem és a dozimetria nemzetközileg is elismert képviselője. Írásából izgalmas és tanulságos történetekről, a sikerek mellett azonban szomorú konzekvenciákkal járó hibákról, hiányosságokról is értesülünk.

Lényeges előrelépést jelentett a hazai egészségügy területén, hogy 1936-ban a Bakáts-téren megnyílt az Eötvös Loránd Rádium és Röntgen Intézet, ahol egy rádiumágyút és több száz rádiumtűt, valamint tubust használtak. Az említett intézetből átszervezés során 1949-ben jött létre az Országos Onkológiai Intézet, amely 1952-ben költözött a Ráth György utcai volt Postás Kórházba.

A könyvrészlet alapján végigkísérhetjük a sugárvédelem továbbfejlesztésének gondos, körültekintő munkáját, aminek középpontjában maga a szerző volt. A munka eredményeként sugárfizikusai a külföldi példáknál sokszorosan jobb sugárvédelmi eszközöket, eljárásokat fejlesztettek ki. Néhány mozzanat a mesterséges radioizotópok orvosi felhasználásának sugárvédelmi problémáival kapcsolatban: a teljes sugárvédettséget biztosító álló és mozgómezős kobaltágyúk (Gravicert szabadalmak), új típusú dózis- és aktivitásmérők, utántöltős készülékek, egésztest-számlálók kifejlesztése, betatron üzemeltetési és sugárvédelmi problémájának megoldása, stb. A problémakör kiszélesedését, egyúttal a felelősség tudatosodását is jelzi a kutatóintézeteken kívül a különböző szervezetek, testületek létrehozása, pl. a Központi Izotóp Bizottság, az Országos Atomenergia Bizottság, a KÖJÁT Sugárvédelmi Állomások létesítése, számos szabvány és óvórendszabály elkészítése, izotóptemetők létesítése és üzemeltetése, Országos Filmdozimetriai Szolgálat beindítása, stb.

A könyv III. fejezete (kb. 50 oldal) KOBLINGER LÁSZLÓ munkája: *Sugárvédelem az ipari és mezőgazdasági munkáknál, sugárvédelmi kutatások és szervezetek, műszergyártás*. Itt értesülünk a KFKI-ben, a Mecseki Ércbányászati Vállalatnál szervezett dozimetriai, ill. sugárvédelmi részlegek munkájáról, a KFKI kísérleti atomreaktoránál, a BME tanreaktoránál, az Izotóp Intézetben hasonló céllal működő csoportokról stb. A fejezet példákat említ az ipari és mezőgazdasági sugárvesztélyes munkáknál adódó kérdésekre, és az előző fejezetek kiegészítéseként foglalkozik a személyi dózisméréssel is, pontosabban a szilárdtest-doziméterek hazai alkalmazásaival és fejlesztésével, érintve a neutron dózismérés problémáit is. Értesülünk a hazai inkorporáció-vizsgálatok fejlődéséről, az eredményekből levont következtetésekről. A szerző beszámol a hazánkban évek óta széles körben folyó környezetellenőrzésről (levegő, talajok, vizek, növényzet, építőanyagok, stb. vizsgálata), amelyekből következtetéseket vontak le a népesség természetes és mesterséges eredetű háttérsugárzásának alakulására. Említés történik a paksi atomerőmű sugárvédelmével kapcsolatos feladatokról is, végül olvashatunk a sugárvédelmi műszerek hazai gyártásáról, a dózismérők hitelesítéséről, a hazai és nemzetközi sugárvédelmi egyesületek tevékenységéről. — Kár, hogy a szerző figyelmét elkerülték a SOTE Biofizikai Intézetének nemzetközi kihatású eredményei, amelyek az ötvenes években a szcintillációs kristálydetektorok és a nukleáris medicina területén születtek.

Összefoglalásként megállapíthatjuk, hogy a könyv interdiszciplináris témájánál fogva sokak számára nyújt érdekes és tanulságos információkat, amelyek között számos, eddig nem publikált és lassanként feledésbe merülő kultúrtörténeti adat, esemény is szerepel.

Tarján Imre

**Mendel Sachs: General Relativity and Matter
Reidel, Dordrecht, 1982**

A monográfia az általános relativitáselmélet alapjait foglalja össze, de kitér a szerző saját elképzeléseire is ebben a témakörben. Gonddal csiszolt munka; magával ragadja az olvasót mindjárt az első, az elveknek szentelt fejezet pezsgő szelleme. A szerző leszögezi, hogy álláspontja az einsteini filozófiával azonos. Elszomorít, hogy meg kell állapítanom: meghirdetett programjával ellentétben újra és újra letér az einsteini útról, és ezek a kitérők mindahányszor súlyos defektusokat hoznak munkájába.

A tisztán az általános relativitáselmélet elemeivel foglalkozó fejezetek mentesek az említett problémáktól. A differenciálgeometriai előkészítést tartalmazó 2. fejezet azonban teljesen elavult szemléletű. Hiányzik belőle a differenciálható sokaságokról a modern differenciálgeometria által nyújtott világos leírás — helyette matematikai manipulációk gyűjteményét nyújtja. A 3. fejezet bevezeti a kva-

terniókat. Nem derül ki azonban, hogy miféle előny származik ezek használatából például a spinor-módszerekhez viszonyítva. Mi több, a (3.20) egyenlettel kapcsolatban megdudjuk, hogy a kvaterniók teljesen egyenértékű tárgyalást nyújtanak a spinorokkal. Így azután meglepő, hogy a 4. fejezetben a szerző a relativitáselmélet kvaternióegyenleteiből a kölcsönhatások egyesítését véli kiolvasni. Ez a probléma az irodalomban teljesen lezárt: az effajta geometrizálás természetlennek bizonyult.

A szerző nem elégszik meg a Mach-elvnek azzal a megfogalmazásával, hogy a nyugalmi tömeget a világmindenség anyageloszlása alakítja ki. Kiegészítésül hozzáteszi, hogy nem a távoli, hanem a szomszédos anyag befolyásolja döntően a tömeget. Ebből merészen arra következtet, hogy a világmindenség véges („mert nincsen semmiféle szabad anyag...” (1.7. fejezet). Ha az olvasót ez az érvelés még nem készíti szemöldökráncolásra, talán lapozza fel a 6.18. fejezetet, ahol megtalálja az elektron és a müontömeg arányának levezetését az említett elvből. Csak ezrelékes pontossággal (mentegetőzik a szerző a 172. lapon), mert közelítéseket alkalmaztunk. Az elv kozmológiai következményeit — így például a Hubble-állandó megjósolt térbeli változását — pedig a 7. fejezet gyümölcsözteti. Itt a konkrét kozmológiai modelleket erőteljes érvelés helyettesíti. Sachs számára a mikrovilágtól a kozmoszt csupán egy kicsiny, de óvatlan lépés választja el.

A könyvhöz C. Kilmister írt kitűnő bevezetőt.

Perjés Zoltán

**Schäfer F. P. (ed.): Picosecond Phenomena III.
Springer Series in Chemical Physics 23.**

A könyv a nagyszerű sorozat 23. köteteként jelent meg, s a Garmish-Partenkirchen-ben 1982. június 16—18 között rendezett III. „Pikoszekundumos Jelenségek”-kel foglalkozó konferencia anyagát tartalmazza, lényegében „letter” méretű cikkek formájában. Gyorsaságára jellemző, hogy a könyv a konferencia után 5 hónappal már megjelent.

Első látásra talán meglepő, hogy miért éppen a Chemical Physics sorozatban látott napvilágot, annak ellenére, hogy zömmel „tisztá” fizikát tartalmaz. A rejtély magyarázata a beavatottak számára viszonylag egyszerű: Schäfer professzor a göttingeni Biofizikai—Kémiai Intézet vezetője, a konferencia Technikai Bizottságának tagja, s emellett ennek a Springer sorozatnak legaktívabb szerkesztője. Mindezt csak azért tartottuk szükségesnek megjegyezni, nehogy a kémia iránt esetleg nem kellő megértést tanúsító kollégák, az elnevezéstől félrevezetve esetleg elkerüljék, ezt, a valójában igencsak komoly fizikai kérdésekkel is foglalkozó sorozatot.

Különböző konferenciák anyagait már hosszabb ideje jelentetik meg „kemény kötésben”, könyv formájában. Természetes, hogy ilyen körülmények között a bíráló dolga is meglehetősen nehéz, hiszen a több mint száz cikk, végső soron csak a körülmények miatt lépett elő könyvtartalommal. Színvonaluk sokkal inkább jellemző az adott konferencia program-bizottságának ízlésére és választási lehetőségére, mint a sorozat vagy a kötet szerkesztőjéire. Nyilván semmi megemlékezés nem kísérné ezeket a munkákat, ha csak a konferencián közreadott papírkötésű gyűjtemények, vagy rangosabb, illetve kevésbé rangos folyóiratok mellékleteként látnának napvilágot.

Úgy tűnik, hogy ilyen publikálási lehetőség emelheti egy konferencia rangját, ezért fordulnak felé a szervezők. Elgondolkodtató viszont az a jelenség, hogy maguk a szerzők nem túlzottan bíznak az ilyen fajta publikációban. Világos példa erre az adott kötet, aminek anyagát, szinte változtatás nélkül ismételtlen közreadják szerzőik épp a napokban megjelenő rangos folyóiratokban. El kéne dönteni, hogy célszerű egy ilyen publikációs kettősség. (Az tény, hogy a publikációs lista szempontjából feltétlen. Mi magyar kutatók — a remélhetően csak pillanatnyi helyzetben — még külön is örülhetünk e könyvszerű alkalmi folyóiratoknak, mivel ezeknek megvételét jelen kézirat leadásakor még nem korlátozták, s legalább ilyen formában, ha bűjtatottan is, de hozzá juthatunk a legfrissebb eredményekhez.)

Külön felhívnom a figyelmet arra a körülményre, hogy még a gyors levelek is csak 1983 eleji számaikban kezdik „ismételni” a kötet anyagát, amit azonos beérkezési határidővel kaptak meg, míg a szép kivitelű könyv már sokkal korábban megjelent. Ebből a szempontból igen dicséretes a Springer vállalkozása, s érdekes új jelenségre hívja fel a figyelmet a publikációs körülmények változásában.

A konferencia és így a kötet a zömmel lézerekkel előállítható ultrarövid — nanoszekundumoknál rövidebb — fényimpulzusokhoz kapcsolódó témákkal foglalkozik. A pikoszekundumos impulzusok előállításának, mérésének, valamint a különböző területeken történő felhasználásának lehetőségeit taglalja, természetesen nem a teljesség, hanem az egyes szekciókra jelentkező és a konferencián anyagi és egyéb lehetőségek miatt résztvenni képes kutatók által végzett tevékenység tükrében.

A tematikus elemzés adott terjedelemben szinte lehetetlen, így csak azokra a tényezőkre hívnom fel a figyelmet, amik az előző évekhez képest feltűnően hatnak. Jelentős teret kapott a pikoszekun-

dumos kontinuum, a nem szűk spektrális tartományban sugárzó források kérdése. A mérőeszközök sorába beléptek az integrált áramköri technikával készülő ultragyors detektorok és elektromos logikai elemek. Hatalmas erővel folynak a gyors relaxációs folyamatok, más módon elképzelhetetlen vizsgálatai. Itt is különös hangsúlyt kapott a fotoszintézis részfolyamatainak főleg bakterio-rhodopsin-on történő kutatása.

A legszembetűnőbb tendencia, hogy a konferencia sajátos módon saját sirját ássa, s talán nincs messze az idő, mikor átalakul „femtosekundumos jelenségek” konferenciájává. Már most is több előadás foglalkozott a néhányszor 10^{-15} szekundum nagyságrendjébe eső, a látható fény tartományában csak néhány, vagy néhány-tíz optikai ciklust tartalmazó fényimpulzusok gyakorlati és tudományos szempontból egyaránt hihetetlenül érdekes témájával.

Horváth Zoltán György

**Brederlow—Fill—Witte: The High Power Jodine Laser
Springer-Verlag, 1983**

A Springer Kiadó optikai sorozatának 34. köteteként megjelent könyv a nagyteljesítményű jódlézerek területén az utóbbi években végzett intenzív kutató-fejlesztő munka eredményeit foglalja össze, elsősorban az NSZK-ban (Garching) és a Szovjetunióban üzemelő lézereknél összegyűlt tapasztalatok alapján.

Az első, bevezető fejezet után részletesen tárgyalja azokat a spektroszkópiai, kémiai, fotokémiai és kinetikai ismereteket, amelyek a jódlézerek működésének megértéséhez szükségesek. A harmadik fejezet a nagyteljesítményű lézerműködés elveivel foglalkozik. Ehhez először egy rövid lézerrimpulzust kell előállítani, amit egy erősítőláncban való átbocsátás útján erősítenek fel. Egy ilyen elrendezés fizikai és technikai vonatkozásaival ismerkedhetünk meg. A negyedik fejezet azon mechanizmusokat ismerteti, amelyek a lézernyaláb minőségének romlásához, vagyis a hullámfront eltorzulásához, ezen keresztül pedig a fókuszálhatóság csökkenéséhez, továbbá a veszteségek növekedéséhez vezetnek. Az ötödik fejezet technikai kérdésekkel foglalkozik és azon jódlézerek lehetséges variánsait ismerteti, amelyeket elsősorban fúziós kutatások céljára építhetünk. A hatodik fejezetben a Garchingban ezen elvek alapján megépített ASTERIX III. jódlézer leírását találjuk meg, végül a hetedik fejezet a jódlézereknek egy fúziós erőműben való alkalmazási perspektíváival foglalkozik, míg a nyolcadik a kutatási eredményekből levonható gyakorlati következtetések rövid összefoglalását tartalmazza.

A könyv szerzői a téma nemzetközileg kiemelkedő szintű művelői, akik jól foglalták össze és tették elérhetővé a témában dolgozó kutatók számára a legújabb kutatások eredményeit.

Annak ellenére, hogy a könyv elsősorban a jódlézerekkel foglalkozók, ill. az ilyen fényforrást felhasználók számára íródott, könnyen olvasható formában jó tájékozódást nyújt az érdeklődő, de a témával nem foglalkozó szakmai közönség számára is.

Króó Norbert

**Ya. G. Sinai: Theory of Phase Transitions:
Rigorous Results**

Akadémiai Kiadó, Budapest—Pergamon Press, N. Y. 1982.

Szinaj elsősorban a dinamikai rendszerekre: az ergodikus hipotézisre, az entrópiameletre, valamint a róla elnevezett biliárdra vonatkozó eredményeivel tett szert világhírré a matematikusok és a fizikusok között. Talán kevésbé ismert, hogy a fázisátmenetek matematikailag szigorú elméletének is vezető, meghatározó egyénisége, az elméletnek a 60-as évekre tehető kialakulása óta. Erre jelen műve is bizonyíték, amely az MTA Matematikai Kutató Intézetében 1976-ban tartott előadássorozatból született.

A négy fejezet közül az első bevezető jellegű. Megismertet végtelen rendszerekre a Gibbs-állapot alapvető fogalmával és a potenciálokra tett általános feltevések mellett megmutatja ezek létezését. A fejezet tartalmát számos igen érdekes és eredeti példával illusztrálja. A további fejezetek célja a fázisátmenetek tanulmányozása.

A II. és a IV. fejezetek — a mű leglényegesebb részei ezek — a szerző Pirogovval (és részben Minlosszal), illetve Bleherrel közösen kidolgozott rendkívül erős és mély módszereit ismertetik. A Minlosz—Pirogov—Szinaj-féle kontúr módszer Peierls klasszikus gondolatmenetének messzemenő általánosítása, elmélyítése. Az ún. Peierls-feltételnek eleget tevő, diszkrét szimmetriájú rendszerekre nemcsak a fázisátmenet létezésének bizonyítása adódik segítségével, hanem például (i) becsléseket eredményez a korrelációk lecsengésére; (ii) lehetővé teszi a felületi feszültség kiszámolását. A Bleher—Szinaj-féle renormalizációs csoport módszerrel (IV. fejezet) másodfokú fázisátmenetek és a fizikai

szempontból elsősorban érdekes nem-Gauss renorm-invariáns eloszlások írhatók le. Az alapgon-
dolat a legvilágosabban a Dyson-féle hierarchikus modellben szemléltethető, ezen a szerző bemu-
tatja a renorminvariáns eloszlások bifurkációit és — formális szinten — az ε -sorfejtéseket is. Ble-
her és Szinaj módszere hatékonynak bizonyult egydimenziós leképezések univerzalitási tulajdonsá-
gainak vizsgálatára is (vö. P. Collet—J. P. Eckmann: *Iterated Maps of the Interval as Dynamical*
Systems, Birkhäuser, 1980).

A III. fejezet folytonos szimmetriájú modelleket vizsgál. Dobrusin és Sloszman közös dolgozatát
követve bizonyítja, hogy kétdimenziós modellekben a folytonos szimmetria nem törik (vö. Mermin—
Wagnertétel), továbbá Fröhlich—Simon—Spencer módszerével megmutatja, hogy $d \geq 3$ -di-
menziós Heisenberg modellekben van fázisátmenet. Utóbbi módszert a közelmúltban kiterjedten al-
kalmazták, és a Pirogov—Szinaj-módszer mellett fázisátmenetek igazolására ez lényegében az egyet-
len általános érvényű.

Ennyire új elméletekről a szó szoros értelmében vett tankönyvet ma még nem lehet írni. Ruelle
kitűnő műve, amelynek címe *(Statistical Mechanics: Rigorous Results)* a cím rimel, inkább tan-
könyv, bár az is nehezen olvasható — a téma természetéből következően. Szinaj könyve azzal a cél-
lal íródott, hogy az intelligens olvasó — valószínűleg nem kevés önálló munkával, de — mégis eljut-
hasson az elmélet egyes csúcsaira, elsajátíthasson igen hatékony technikákat, gondolatokat. Ezt a
célrt oly módon valósítja meg, hogy mindannyiszor részletesen megmagyarázza a módszerek heuriszt-
ikus, képszerű alapját, gondolati magját.

Szász Domokos

**T. Matsubara ed. Structure and properties of matter:
Springer Series in Solid State Sciences 28
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York 1982**

Igen átfogó tematikájú könyvet szerkesztett a nemzetközi hírű japán kutató, T. Matsubara.
Szándéka szerint át kívánja tekinteni a szilárdtestfizika főbb fejezeteit; különös hangsúllyal pedig
az utóbbi két évtized kutatási területeiből válogat.

A problémák megértéséhez szükséges fogalmakat a könyv első fejezetei szemléletesen vezetik
be. A hidrogénatom, majd a hidrogénmolekula elemzése ad betekintést az elektron-elektron és az
elektron-proton kölcsönhatás természetébe; erre épül aztán a jellium modell ismertetése.

A következő két fejezet tárgya a periódusos rendszer következő eleme, a hélium. A témakör
világos, sokszempontú bemutatásában helyet kaptak a fontosabb kísérletek éppúgy, mint az elméleti
eredmények. Ezen belül az egyes fázisokat és azok dinamikáját a Fermi-folyadék teóriára alapozva
ismerjük meg.

Az ezt követő passzusok a fémekkel, illetve a nemfémekkel foglalkoznak, nyilván a kézikönyv-
jelleg erősítése érdekében. A kristálytípusok részletező számbavételénél mutatkozik meg annak az
előnye, hogy a bevezetőben az atomi és molekuláris tulajdonságoknál sokáig időztünk. A két fejezet
nagy részét az elektronszerkezetre vonatkozó klasszikus gondolatok felidézése teszi ki, talán túlsá-
gosan is háttérbe szorítva például a termodinamikai tulajdonságokat.

A fémeknél a tárgyalás a pseudopotenciálra alapozódik, míg a félvezetők sávszerkezetét egy
külön fejezet ismerteti, a Bond Orbital Model szerint. A közelítések pontosságát mindkét esetben a
numerikus és a kísérleti eredmények egybevetése demonstrálja.

A mágnességet a jó tankönyvek színvonalán tárgyalják a szerzők, elég kimerítően. A mágnesség
eredete után annak típusai, majd azok lehetséges rendeződései kerülnek sorra. A fázisátalakulások
témakörét azonban épphogy csak érintik a szerzők. A fejezetet az egyrészecskés és a kollektív ger-
jesztések áttekintése zárja.

A könyv második része közelít a hetvenes évek fizikájához, ezen belül a rendezetlen rendszerek
kérdéseire.

Egy teljes fejezet foglalkozik a Kondo-effektussal; az elméleti leírásnál többek között a renor-
málási csoport módszer aránylag világos ismertetése is megtörténik.

Az ezutáni rész kissé eklektikusan válogat a nemkristályos anyagok szerzeágazó tematikájából.

A könyv zárófejezete értékes munka, az ötvözetek és a rendezetlen rendszerek leírásában igen
sikeres koherens potenciál közelítés (CPA) letisztult tárgyalását adja, sokoldalúan elemelve alkal-
mazhatóságát, érvényességét és a kapcsolódó elméleteket.

A sokat ígérő címnek tehát nem tesz eleget a szerkesztés, hiszen olyan alapvető témakörök hiá-
nyoznak, mint például a fononok, a transzportjelenségek és a plazma fizikája. A kiválasztott terüle-
tek elméletébe viszont többségében jó színvonalú, didaktikus bevezetéseket kap kézhez az olvasó.

A teória iránt érdeklődő kísérleti, illetve az általánosság szintjén tájékozódni kívánó elméleti
fizikusoknak ajánljuk ezt a könyvet.

Zimányi Gergely

Tarján Imre (szerk.) A biofizika alapjai
Medicina Kiadó, Budapest

1982 elején jelent meg A biofizika alapjai című tankönyv ötödik átdolgozott kiadása, 340 oldal terjedelemben 242 ábrával. Szerkesztette Tarján Imre, íróársai: Berkes László, Györgyi Sándor, Rontó Györgyi és Voszka Rudolf.

A nemzetközi viszonylatban is kitűnőnek elismert tankönyvnek nagy múltja van, amennyiben első kiadása még 1964-ben jelent meg, a második kiadását már orosz és lengyel nyelvre is lefordították, a jelenlegi ötödik kiadás angol nyelvű megjelentetése folyamatosan van az angol Ellis Harwood és az Akadémiai Kiadó együttműködésében.

Ezt a csaknem két évtizedes múltat különösen nagyra kell értékelnünk ma, amikor a tankönyvek nagy részének életkora csak néhány év. Mert általában minden területen a rendkívül felgyorsult fejlődés következtében a tárgyalandó tananyag mennyisége rohamosan nő, a rendelkezésre álló tantervi óraszám viszont legjobb esetben is csak változatlan marad. Így a tankönyvíróknak szükségszerűen egyrészt egyre többet kell a régebbi tananyagból elhagyniok, vagy lerövidíteniök, másrészt egyre nehezebb eldönteniök, hogy a sok újból mit és hogyan tárgyaljanak.

Ezen túlmenően a tudományok fejlődésének egyik, korunkra jellemző tünete a határtudományok jelentőségének gyors növekedése, amire érthető módon érzékenyen reagál az oktatás, amelynek a jövőbe kell tekintenie. Különösen nagy érdeklődést váltott ki a múltban és nem kisebb figyelmet kelt és érdemel napjainkban is a biofizika oktatásának kérdése. A biofizika az utolsó évtizedekben hatalmas, komplex határterületté vált, ma már nemcsak a biológus- és orvosképzésben áll az érdeklődés előterében, de hatással van a fizikus- és kémikusképzésre, ill. továbbképzésre is.

A biofizikának egyik fő feladata a *jövőbe mutató*, azaz felismerni azt, ami már ma is jelzi a jövőt formáló irányokat, amit aztán az orvos átvesz, alkalmaz és továbbfejleszt.

A tankönyv anyagának összeállításánál a szerzők — hosszú éveken át összegyűjtött saját tapasztalataikra támaszkodva — igen szerencsés kézzel és mélyreható *tudományos előrelátással* tudták kiválogatni azokat az alapelveket és ismereteket, amelyeket a ma medikusa néhány év múlva már a gyakorlatban, vagy kutató munkájában fog alkalmazni. A múlt sok példával szolgál: röntgensugárzás, radioaktív izotópok, magsugárzások, stb., de a közelmúlt és a jelen sem szűkölködik bizonyító példákkal: makromolekulák szerkezete, termodinamika, elektronika, kibernetika (szabályozás-elmélet) alapjai, az elektrontranszfer a molekuláris kölcsönhatásokban, stb.

A könyv 7 fejezetre tagozódik.

Az első fejezet az atomok, molekulák felépítésével és kölcsönhatásaival, valamint a kondenzált rendszerek (biológiai makromolekulák) tér- és elektron szerkezetével foglalkozik. Ez a tárgykör *anyagszerkezeti alapokat* nyújt a biológiai jelenségek molekuláris szintű törvényszerűségeinek, a *szerkezet és a funkció közötti kapcsolat* mélyebb összefüggéseinek a megértéséhez. A tárgyalás a kvantummechanika eredményeire épül, de mellőzi a kvantummechanika felépítésének és az eredményekhez vezető utaknak az egzakt bemutatását. A szerző ugyanis úgy véli, hogy a részletekbe menő tárgyalás az általános orvosképzés keretében szükségtelen, és jelenleg hiányzik a mélyebb tárgyaláshoz szükséges matematikai és fizikai bázis is (Tarján).

A második fejezet a *sugárzások* orvosi alkalmazásának fizikai alapjaival, a sugárzás és anyag kölcsönhatásaival, a sugárzások detektálásával, a dozimetriai mérések rendkívül világosan megírt elméleti és gyakorlati kérdéseivel foglalkozik (Tarján).

A harmadik fejezet a *mikroszkópos*, valamint a biológiai struktúrák vizsgálatában egészen újszerű, jelentős *szubmikroszkópos szerkezetvizsgáló módszereket* tárgyalja, amilyenek pl. a különféle diffrakciós eljárások, a mágneses rezonancia-spektroszkópiái módszerek stb. (Tarján—Voszka).

A negyedik fejezet a *transzportfolyamatokkal, áramlási jelenségekkel* és az életfolyamatok megértése szempontjából ugyancsak fontos *termodinamikai alapvetéssel* foglalkozik. A termodinamikának a biológiai problémák által is katalizált új ága, a nem egyensúlyi termodinamika lehetővé teszi a folyamatok részletes tárgyalása mellett azoknak egységes szempontból való áttekintését is (Tarján—Györgyi).

Az ötödik, *bioelektronika* című fejezet az elektronikus alapelemeket, az oszcillátorok és elektromos impulzusok egyes orvosi alkalmazásait tárgyalja, kitérve az ultrahang keltésével és felhasználásával kapcsolatos kérdésekre, a nagyfrekvenciás hőterápiára, stb. Mindezt a szerzők a műszaki részletek mellőzésével úgy tárgyalják, hogy alapokat nyújtsanak az orvostechikai kultúra kialakításához (Berkes—Voszka).

A hatodik, az *ingerületi folyamatok biofizikája* című fejezet önmagában is érdekes és lényeges kérdés, a könyvbeli szerepe azonban távolabbra mutat, amennyiben e tárgykör révén példákat mutat a fizikai modellalkotásra (Rontó).

Végül a hetedik fejezetben a *hírközlés és szabályozás* néhány alapkérdéséről van szó, amihez legkorszerűbb, aktuális *biokibernetikai* kiegészítések kapcsolódnak (Tarján—Rontó).

A könyvet 7 oldalnyi értékes táblázatok, részletes tárgymutató és igen szép kivitelű fényképeket tartalmazó 7 oldalas illusztráló rész egészíti ki. A táblázatok között a hagyományos és az SI-egységek átszámítási adatai is szerepelnek, különös tekintettel az erő-, az energia- és a nyomás-egységekre. A könyv egyébként az egységek alkalmazását illetően is korszerű kívánn lenni, és következetesen az SI rendszert alkalmazza.

Külön ki kell emelnünk a könyv jól átgondolt, egységes felépítését, amennyiben egyrészt a középiskolai fizikaoktatás anyagát ismertnek tételezi fel, másrészt figyelemmel van más tárgyak igényeire, az azokkal való koordinálás nyújtotta lehetőségekre és általában arra, hogy ne csupán új ismereteket nyújtson, hanem ezeken keresztül átfogó, kvantitatív természettudományos szemléletet alakítson ki.

Stílusa rendkívül világos, szabatos, gördülékeny, a könyv kiállítása méltó a tartalomhoz.

Összefoglalva örömmel állapíthatjuk meg, hogy egy olyan egészen kiemelkedő új tankönyvvel gyarapodtak orvostudományi egyetemünk, amely nemcsak a most felnövő orvosnemzedék számára fogja nagy mértékben megkönnyíteni az egyre szélesebb körű, nélkülözhetetlen biofizikai ismeretek elsajátítását, hanem amelyből a már gyakorló orvos-társadalmunk is tájékozódhat a legújabb, biofizikai vonatkozású orvostechnikai eljárások elméleti és gyakorlati kérdéseiről.

Bozóky László

**H. Ryssel és H. Glawischnig (ed.-s): Ion Implantation Techniques
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982.**

A mű alcíme: Lectures given at the Ion Implantation School in Connection with the Fourth International Conference on Ion Implantation: Equipment and Techniques, Berchtesgaden, Fed. Rep. of Germany, September 13—15, 1982.

Az ionimplantáció módszerét sokrétűen alkalmazzák napjaink finomtechnológiáiban, és a lehetőségeit még távolról sem merítették ki. Erre utalnak azok a rendszeres konferenciák is, amelyeket a tárgykörben rendeznek. A fizikai, anyagtudományi megalapozás terén elért eredményeket az Ion Beam Modification of Materials konferencia-sorozat (1978, Budapest óta; azelőtt Ion Implantation in Semiconductors), a technikai berendezések fejlődését az International Conference on Ion Implantation: Equipment and Techniques kétévenkénti konferenciákon foglalják össze. Sok eredményt publikálnak egyéb, pl. az Ion Beam Analysis, Annual Meeting of the Materials Research Society konferenciáin is. Az Equipment and Techniques konferenciák mellett immár másodízben rendezték meg azt az iskolát, amelyet a világ iparában foglalkoztatott mérnökök, magas szintű technikusok és kezdő kutatók számára szerveznek, olyanoknak, akiknek a napi munkájuk mellett nincs módjuk fejlődésében követni az implantáció elvi, anyagismereti alapjait. Az 1982-es iskola volt az első, amelynek előadásait könyvként rendezve is kiadták. A könyv — személyes véleményem szerint — kitűnő összefoglalója a tárgykör mai állásának.

A 370 oldalon tizenhat tanulmányt közölnek. Négyet az implanterek jelenlegi konstrukciós kérdéseiről, hármat az ionok behatolási kérdéseiről, négyet a kialakított adalékeloszlások minősítésére alkalmas módszerekről, négyben a legújabb implanter-modelleket és egy továbbiban egy új ion mikrópróbát ismertetnek.

Az implantációval szemben támasztott homogenitási, reprodukálhatósági követelmények szorítása alatt külön technikai tudományággá vált az implanterek fejlesztése. Az egyéb rendeltetésű gyorsítóknál jelentkező feladatoktól eltérő megoldások kellenek pl. a dózismérés, a nyálábsepergetés, az átbocsátó képesség (termelékenység) terén. Teljesen új típusú ionforrásokat kellett kifejleszteni a nagy dózisu (10^{16} — 10^{17} ion/cm²) implantáció gyors elvégzésére.

A létrejött adalékeloszlás számítása, modellezése új területként jelentkezik a gyakorlati felhasználás terén. Ma már léteznek olyan — részben első elvekből kiinduló, részben tömeges kísérleti adatokat beépítő — programok, amelyek a kész félvezető eszköz paramétereit számítják ki egy választott, implantációs lépéseket is tartalmazó technológiai lépéssorrend esetére. Ezért értékesek a könyvnek az ionok behatolásával kapcsolatos fejezetei.

Jó összefoglalót találunk a kialakított rétegek minősítésére használatos eljárásokról. Ezek egy része elektromos mérés, más része a teljes dózis kimutatására, mélységi eloszlásának megismerésére alkalmas. Ilyenek a SIMS (szekundér ion tömegspektrometria), az RBS (Rutherford ion visszaszórás) és ezzel kapcsolatban a csatornahatás mérése. Ha a defektek analízise a cél, az elektronmikroszkóp az elsődleges (ezzel kapcsolatos az egyik fejezet).

A konkrét berendezéseket ismertető fejezetek már inkább csak a témát ipari szinten művelők érdeklődését hivatottak kielégíteni — azaz itt eléggé speciális a mű. A kiemelten ismertetett fejezetek miatt azonban a könyvet azoknak a fizikusoknak, vegyészeknek, mérnököknek is érdemes a kezükbe venniük, akiket a téma csak áttételesen érdekel.

Gyulai József

**M. Cardona and G. Güntherodt (editors):
Light Scattering in Solids III. Recent Results
Topics in Applied Physics, vol. 51
Springer-Verlag, Berlin, 1982**

Míg a szilárdtestek fényszórásával foglalkozó sorozat előző kötetében a módszer általános elveit és műszerezettségét mutatták be a szerzők, a jelen kötet speciális anyagcsoportokon végzett vizsgálatok eredményeit foglalja össze. Ezen keresztül bemutatják a Raman, ill. a Brillouin szórás alkalmazhatóságát a modern szilárdtest-fizikai kutatásban.

A szerkesztők bevezető áttekintése után a második fejezetben M. S. Dresselhaus és G. Dresselhaus bemutatják a grafitba ágyazott vegyületek Raman-szórását, az ebből levont kristályszerkezeti tapasztalatokat. A harmadik fejezet (D. J. Lockwood) az átmeneti fémionok kristályaiban létrejövő magnonokon való Raman szórást, illetve a vas, kobalt és nikkell ionokat tartalmazó kristályokban megvalósuló elektrongerjesztéseken létrejövő fényszórást elemzi, valamint ezen jelenségek hőmérséklettől való függését vizsgálja.

W. Hayes a negyedik fejezetben a szupraionvezetőkben a Raman szórás segítségével megfigyelhető dinamikai folyamatokkal foglalkozik, valamint az ionok diffúziós mozgásából eredő kvázilaszitkus (Brillouin) szórásvizsgálatból nyerhető eredményeket mutat be. Az átmeneti fémek vegyületeiben megfigyelhető finom anomáliákon létrejövő Raman szórást, s a hozzá szükséges elméleti áttekintést nyújtja az ötödik fejezetben M. V. Klein. Külön figyelmet szentel a szupravezető rendszerekben a töltéssűrűség hullámok fononjain létrejövő Raman szórásnak.

A hatodik fejezetben J. R. Sandercock az átlátszatlan és különösen a fémes szilárdtesteken létrejövő Brillouin szórást és egy, az ennek megfigyelésére szolgáló újonnan kifejlesztett tandem Fabry—Perot interferométert ismerteti. Ez a módszer a felületi fononok és magnonok, valamint a kvázilaszitkus gerjesztések tanulmányozását teszi lehetővé átlátszatlan anyagok esetén.

Az utolsó, a hetedik fejezet C. Weisbuch és R. G. Ulbrich munkája a félvezetőkben exciton—polaritonok hatására létrejövő rezonáns fényszórásokat tárgyalja.

A kötetet bőséges, jól használható tárgymutató zárja.

Tóth Katalin

**R. G. Newton: Scattering Theory of Waves and Particles
Springer-Verlag, New York, 1982**

Második, bővített kiadásban jelent meg ez a több mint hétszáz oldalas könyv a „Texts and Monographs in Physics” sorozatban. A mű a szórásproblémák iránt érdeklődő fizikusok, fiziko-kémikusok és matematikusok számára készült összefoglaló, amely az elektromágneses hullámok, a klasszikus és kvantumrészecskék szóródását taglalja, az új kiadásban külön figyelmet irányítva a háromrészecske ütközésre, a nemcentrális potenciálon való szóródásra és a kísérletezők számára igen fontos inverz szórásprobléma megvilágítására.

Az első rész az elektromágneses hullámok szóródásával foglalkozik, kiindulva a Maxwell egyenletekből, az intenzitás-fluktuáción alapuló mérésekig. A második rész a klasszikus részecskék szóródását vizsgálja nem-relativisztikus és relativisztikus esetekben, részletezve néhány speciális jelenséget.

A harmadik, mintegy ötszáz oldalas rész a kvantummechanikai szóródást tárgyalja a Schrödinger-egyenlethől kiindulva, s foglalkozik speciális közelítésekkel, speciális tulajdonságú részecskékkal. A széles körű matematikai és fizikai ismereteket nyújtó anyag megértésére és elmélyítésére ösztönöznek az egyes fejezetek végén található feladatok és kérdések. A könyv végén ötvenoldalas bibliográfia és tárgymutató található.

Tóth Katalin

Maple M. B., Fischer O. (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds I
Springer-Verlag, Berlin. 1982

A Springer Könyvkiadónál 1982-ben megjelent kitűnő mű a háromkomponensű szupravezető vegyületek szerkezeti jellemzőivel, elektron-tulajdonságaival és rács-sajátosságaival foglalkozik. A szerkesztők, Fischer és Maple a szupravezetés kutatásának elismert szakemberei, akiknek személye már garanciát jelent a mű magas színvonalára nézve.

A könyv nem homogén monográfia, illetve egyetlen témakör áttekintő elemzése, hanem a háromkomponensű szupravezetők egyes aktuális problémáit tárgyaló tanulmányok gyűjteménye, amelyeket különböző szerzők írtak.

A könyvben szereplő 8 dolgozat (a szerzők feltüntetésével) a következő:

1. Háromkomponensű szupravezető vegyületek: helyzetkép és perspektívák (O. Fischer, M. B. Maple),
2. Háromkomponensű molibdén kalkogenidek kémiaja és szerkezete (R. Chevrel, M. Sergent),
3. A háromkomponensű szupravezetők szerkezete és kötése (K. Yvon),
4. Metallurgia és szerkezeti transzformációk háromkomponensű molibdén kalkogenidekben (R. Flükiger, R. Baillif),
5. Vékony-réteg háromkomponensű szupravezetők (J. A. Woollam, S. A. Alterovitz, H. L. Luo),
6. $M_xMo_6X_8$ and $M_2Mo_6X_6$ sávszerkezete, klaszter ötvözetek (H. Nohl, W. Klose, O. K. Andersen),
7. Fononok háromkomponensű kalkogenid szupravezetőkben (S. D. Bader, S. K. Sinha, B. P. Schweiss, B. Renker),
8. Elektron-fonon kölcsönhatások Chevrel-fázisos vegyületekben (F. Pobell, D. Rainer, H. Wühl).

A könyvben leírt vizsgálatok kitekintést adnak a „mágneses szupravezetőkre” is, ami már önmagában is roppant érdekes téma, hiszen korábban a kutatók még azt gondolták, hogy „a szupravezetés és a mágnesség úgy fér meg egymás mellett, mint a tűz és a víz”.

A háromkomponensű szupravezetők iránti érdeklődés 1972-ben kezdődött, amikor B. T. Matthias és munkatársai felismerték bizonyos háromkomponensű molibdén sulfidok szupravezetését, amelyeket egy évvel korábban R. Chevrel és munkatársai állítottak elő.

Mivel ezek magas kritikus hőmérsékletekkel és kritikus mágneses terekkel rendelkeznek, alkalmazási szempontból már korán az Al₅-ös szupravezetők versenytársainak ígérkeztek.

A háromkomponensű molibdén kalkogenidek vizsgálata új fejezetet jelentett a szupravezetés kutatásában. Számos új és meglepő szupravezetési jelenség birtokosairól lévén szó, óriási apparátussal folyik jelenleg is a kutatásuk kísérleti és elméleti módszerekkel egyaránt.

A ritka földfém-molibdén kalkogenidek és a ritka földfém-rádium boridok azért különös fontosságúak, mert ezek voltak az első olyan szupravezetők, amelyek rendezett mágneses ionokat tartalmaztak. Az idevonatkozó vizsgálatok hozzájárultak a szupravezetés és a mágnesség koexistenciájának megértéséhez. De ez már elsősorban e mű II. kötetének a tematikája.

A könyv a „Topics in Current Physics” című Springer-sorozat 32. köteteként jelent meg.

Kirschner István

Maple M. B., Fischer O. (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds II
Topics in Current Physics. Vol. 32.
Springer-Verlag, Berlin. 1982

A szupravezetők kutatásának igazi szennzációját jelenti néhány év óta a mágneses szupravezetők gyakorlati létének felismerése és szerfelett érdekes tulajdonságaik megismerése. A szupravezetés és a mágnesség közötti kőjáték már több, mint negyedszázada tart, azóta, hogy V. L. Ginzburg 1957-ben először felvetette a szupravezetés és a ferromágnesség koegzisztenciájának a kérdését. Bár az idevonatkozó első kísérleteket B. T. Matthias és munkatársai már 1959-ben elvégezték, ezek nem vezettek egyértelműen értékelhető eredményre. A kísérleti módszer lényege az volt, hogy tiszta szupravezetőbe kis koncentrációban ritka földfém szennyezést vittek be és vizsgálták az ily módon előálló híg, szennyezett rendszer szupravezetési tulajdonságait. A probléma azonban túlságosan komplikált volt ahhoz, hogy ilyen nem-egyértelmű körülmények mellett határozott következtetést lehessen levonni a szupravezetés és a mágnesség együttes létezésének a kérdéséről.

A könyv 9 fejezetét a szupravezetés neves kutatói írták a témakör fontos és aktuális problémáiról. Az egyes dolgozatok címei minden esetben jól tükrözik az általuk lefedett témát. Ezek (a szerzők nevének feltüntetésével) a következők:

1. Mágneses szupravezetők (M. B. Maple, O. Fischer),
2. A háromkomponensű ötvözetek szupravezetésének szisztematikája (D. C. Johnston, H. F. Braun),
3. Háromkomponensű molibdén kalkogenidek kritikus mágneses terei (M. Decroux, O. Fischer),
4. Szupravezetés, mágnesség és kölcsönhatások háromkomponensű ritka földfém-ródiium boridokban és ritka földfém-átmeneti fém sztannidokban (M. B. Maple, H. C. Hamaker, L. D. Woolf),
5. Szupravezetés és mágnesség (RF) Mo_6X_8 típusú vegyületekben (ahol RF = ritka földfém) M. Ishikawa, O. Fischer, J. Müller),
6. Elektronszerkezet és szupravezetés, illetve mágnesség háromkomponensű vegyületekben (A. J. Freeman, T. Jarlborg),
7. Háromkomponensű szupravezetők NMR és Mössbauer vizsgálata (B. D. Dunlap, G. K. Shenoy, C. W. Kimball),
8. A mágneses rendezettség tanulmányozása neutron szórással háromkomponensű szupravezetőkben (W. Thomlinson, G. Shirane, J. W. Lynn, D. E. Moncton),
9. A mágneses szupravezetők elmélete (P. Fulde, J. Keller).

E témákon belül a legkülönbözőbb specifikus kérdések szerepelnek, amelyek a háromkomponensű szupravezetők kísérleti és elméleti vizsgálatában jelenleg érdeklődésre tarthatnak számot. Csak szemléltetésül megemlíjtük közülük pl. a CeCo_4B_4 , vagy a LuRh_4B_4 , illetve az $\text{Sc}_5\text{Co}_2\text{Si}_{10}$ struktúrát, a ferromágneses és az antiferromágneses szupravezetők, az anizotrópia-effektusokat, a felső kritikus mágneses tér tulajdonságait, az energia-sáv számításokat, a Chevrel-fázisok kérdését, a kriptoferromágneses spin struktúrákat és a kicserélődési kölcsönhatások szerepét.

1976–77-ben a $\text{Re}_x\text{Mo}_6\text{X}_8$ és a RFRh_4B_4 specifikus tulajdonságainak érdekessége miatt a háromkomponensű szupravezető vegyületek kutatásának egy új fejezete nyílt meg. E különleges jellemzők két alapvető tényből fakadnak: 1. a vezetési elektron spinek és az RF atomok mágneses momentumai között nagyon gyenge kicserélődési kölcsönhatások vannak, és 2. az RF ionok egy rendezett alrácsot alakítanak ki. Az előbbiből következik ezen vegyületek klaszter szerkezete, amely azt eredményezi, hogy a szupravezetés még a viszonylag magas RF-ion koncentrációnál is fennmarad, az utóbbi pedig egy hosszútávú mágneses rendezettséghez vezet, jól definiált fizikai sajátosságokkal. A fellépő mágneses rendezettségi hőmérsékletek összevethető értékűek a szupravezetési átmeneti hőmérsékletekkel.

Mindezek együttesen eredményezték azt a gyors fejlődést, amely az utóbbi fél évtizedben a háromkomponensű szupravezetők kutatásában végbement, és amiről hiteles képet ad ez a könyv.

A mű a Springer Könyvkiadó „Topics in Current Physics” című sorozatának 34.-ik köteteként jelent meg, és a 32.-ik kötettel együtt alkot szerves egészet.

Kirschner István

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1982. április 19. — Terjedelem: 9,10 (A/5) ív

82-3461 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Szépfasusyné Menyhárd Nóra</i> : Kvázi-egydimenziós vezetők elmélete	171
<i>Nagy Károly, Tél Tamás</i> : Elektromágneses hullámok anizotrop közegekben	239

KÖNYVISMERTETÉS

<i>M. Schulz, G. Pensl</i> : Insulating Films on Semiconductors	251
<i>E. Pietronero, E. Tosatti</i> (editors): Physics of Intercalation Compounds	253
<i>Landolt—Börnstein</i> : Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles	253
Neutron Radiography Handbook	254
<i>D. Berényi and G. Hock</i> (editors): High-Energy Ion-Atom Collisions	254
<i>A. Benninghoven, J. Giber, J. László, M. Riedel, M. W. Werner</i> (editors): Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS III	255
<i>C. Vidal, A. Pacault</i> (editors): Nonlinear Phenomena in Chemical Dynamics	256
<i>Landolt—Börnstein</i> : Numerical Data and Relationships in Science and Technology	257
<i>G. Marx</i> (ed.): Nuclear Physics. Nuclear Power. GIREP Seminar on the Teaching of Physics in Schools	257
<i>I. Lindgren and J. Morrison</i> : Atomic Many-Body Theory	258
<i>Szépfasusy Péter és Tél Tamás</i> (szerk.): A KÁOSZ	259
<i>Jagdish Mehra and Helmuth Rechenberg</i> : The Historical Development of Quantum Theory	260
<i>L. Brekhovskikh—Yu. Lysanov</i> : Fundamentals of Ocean Acoustics	261
<i>Landolt—Börnstein, Group III., 15a</i> : Metals: Electronic Transport Phenomena	263
<i>Bisztray-Balku Sándor, Bozóky László és Koblinger László</i> : A sugárvédelem fejlődése Magyarországon	263
<i>Mendel Sachs</i> : General Relativity and Matter	264
<i>Schäfer S. P.</i> (ed.): Picosecond Phenomena III	265
<i>Brederlow—Fill—Witte</i> : The High Power Jodine Laser	266
<i>Ya. G. Sinai</i> : Theory of Phase Transitions, Rigorous Results	266
<i>T. Matsubara</i> (ed.): Structure and Properties of Matter	267
<i>Tarján Imre</i> (szerk.): A biofizika alapjai	268
<i>H. Ryssel és H. Glawisching</i> (ed.-s): Ion Implantation Techniques	269
<i>M. Cardona és G. Güntherodt</i> (ed.-s): Light Scattering in Solids III. Recent Results	270
<i>R. G. Newton</i> : Scattering Theory of Waves and Particles	270
<i>Maple M. B. és Fisher O.</i> (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds I	271
<i>Maple M. B. és Fisher O.</i> (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds II	271

307.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

4 FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

g

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A MAGSZERKEZET SZEREPE TÖBBNUKLEONT ÁTADÓ MAGREAKCIÓKBAN*

APAGYI BARNABÁS

BME Fizikai Intézet, Fizika Tanszék

TARTALOM

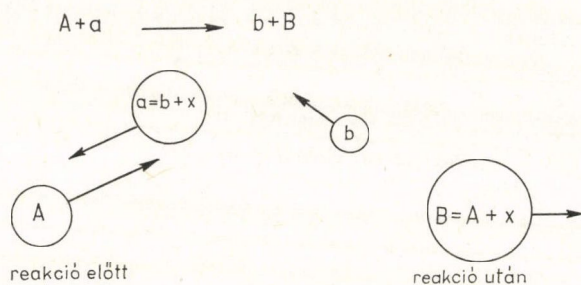
1. Bevezetés	273
2. A cluster transzfer reakciók fenomenologikus leírása és a mikroszkopikus módszer elméleti megalapozása	276
2.1. Általános megjegyzések a magreakciókról és a transzfer reakciók információ-tartalmáról	276
2.2. A módszer elméleti alapjai	279
2.3. Eredmények a fenomenologikus DWBA elmélet keretén belül a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*[E_i]$ α -transzfer átmenetekre	287
2.4. A mikroszkopikus módszer kiválasztása	296
3. Az α -spektroszkópiai amplitúdó (ASA) származtatása	298
3.1. Az ASA definíciója Zuker, Buck, McGrory-féle héjmodell hullámfüggvények használata esetén	298
3.2. ASA eredmények az $^{16}\text{O } J_i^\pi = (0^+, 1^-, 2^+, 3^-, 4^+, 6^+)_{i=1-4}, T=0$ állapotaira	305
3.3. Az ASA eredmények diszkussziója	305
3.3.1. Az α -spektroszkópiai faktorok információ-tartalma	305
3.3.2. ASA értékeinek összehasonlítása az SU(3) modellből nyert eredményekkel	308
3.3.3. Az ASA-kból nyerhető magszerkezeti információk	309
3.3.4. Az ASA-k szerkezetének analízise	313
4. A mikroszkopikus módszer alkalmazása a $^{12}\text{C}_{\text{gs}}(^6\text{Li}, d_i)$ átmenetek leírására	317
4.1. A mikroszkopikus leírás közelítései	317
4.2. A mikroszkopikus alakfaktorok meghatározása	318
4.3. A szögeloszlások meghatározása	321
5. Összefoglalás	328
6. Függelék: Az a_{NL} speciális α -spektroszkópiai amplitúdó (SASA) redukálása programozható alakra	329
7. Irodalomjegyzék	334
Köszönetnyilvánítások	336

1. BEVEZETÉS

Napjaink nehézion gyorsítói egyre változatosabb magreakciók létrehozását teszik lehetővé. Lehetőség van például olyan reakciók tanulmányozására, amelyekben a céltárgy (target) és a lövedék magja között egy vagy több nukleon átadódik. Ezeket a magreakciókat *transzfer reakcióknak* hívjuk. Amennyiben a lövedék ad át nukleon(oka)t a targetnak, stripping reakcióról, ellenkező esetben pick-up reakcióról beszélünk. Az 1. ábra a stripping reakció közvetlen (direkt) úton lezajló folyamatát szemlélteti.

Minden magreakció kísérlet hátterében az a szándék húzódik meg, hogy az atommag szerkezetéről és/vagy a nukleonok közti kölcsönhatásról információt

* Érkezett: 1981. aug. 29.



1. ábra. $A + (b+x) \rightarrow (A+x) + b$ stripping reakció szemléltetése

nyerjük. Közismert az, hogy a transzfer reakciók magszerkezeti információk kivonására alkalmasak. Egy-, két-, ill. többnukleon transzferrel a hullámfüggvény azon „részét” tesztelhetjük, amely egy-, két-, ill. többnukleon állapot magon belüli létezésére utal (lásd 2.1. fejezet).

A kísérletekből kivont magszerkezeti információt a kísérleti spektroszkópiai faktor tartalmazza, amelyet a mért és számolt hatáskeresztmetszetek viszonyaként definiálnak. Ekkor a hatáskeresztmetszetet olyan fenomenologikus reakcióelméletből számolják, amely a magszerkezetet figyelmen kívül hagyja. Mivel az irodalomban egyre nagyobb számban látnak napvilágot többnukleon transzfer kísérletekről és fenomenologikus interpretálásukról szóló munkák, [2, 79] ugyanakkor azonban igen kevés cikk foglalkozik a többnukleon spektroszkópiai faktorok elméleti számolásával és még kevesebb a transzfer reakciók mikroszkopikus vizsgálatával, szükségesnek mutatkozik az atommagok többnukleon spektroszkópiai faktorainak elméleti meghatározása és a transzfer reakció problémakör magszerkezeti szempontból történő áttekintése.

A dolgozat gyakorlati célkitűzése ezért kettős: egyrészt megkísérli részlegesen pótolni a többnukleon spektroszkópiai faktorok elméleti számítása terén mutatkozó hiányt azáltal, hogy az $^{16}\text{O}^*$ atommag 24 különböző állapotára meghatározza az α -spektroszkópiai faktorokat és az ezekhez szükséges spektroszkópiai amplitúdókat, másrészt mikroszkopikus módszert kíván alkalmazni az α -cluster transzfer reakciók leírására, amellyel a transzfer reakciók problémakörének mélyebb, a magszerkezetet is figyelembe vevő, általánosabb megértése válik lehetővé. E módszer lényege — amint azt a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*$ transzfer reakció öt átmenetére végzett szisztematikus számolásaink is mutatni fogják — abban áll, hogy a targetmagra és a végmagra mint mikroszkopikus részecskerendszerre tekintünk, szemben az általános gyakorlattal, amely a transzfer reakciókban résztvevő magoknak nem tulajdonított szerkezetet.

A dolgozat elvi célja az, hogy felhívja a figyelmet a magszerkezeti információt tartalmazó spektroszkópiai amplitúdóknak a cluster transzfer reakciók leírásában betöltött fontos szerepére. Az elméleti megalapozásban (2.2. fejezet) a szokásosnál „bonyolultabban” fogjuk felírni a reakció amplitúdó x -cluster transzferre specifikált torzított-hullámú Born-közelítésbeli (DWBA-beli) alakját, hogy kihangsúlyozzódjon a magszerkezet szerepe a reakcióamplitúdó dinamikai-kinematikai része mellett. A reakció amplitúdó ezen felírásából könnyen megállapítható, hogy mely feltételek esetén alkalmazható transzfer reakciókra a szokásos fenomenologikus leírás. Fogjuk

látni, hogy a fenomenologikus közelítés alkalmazhatóságához vagy a reakcióban résztvevő magok állapotainak kell „tisztának” (nem kevert konfigurációjúnak) lenni, vagy a kinematikai-dinamikai viszonyoknak kell olyannak lenni, hogy a reakció alakfaktorának (definíció a 2.2. fejezetben) csak a külső része adjon járulékot a reakció amplitúdóhoz. Az alkalmazási példának választott $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*$ α -transzfer átmenetek esetén 20 MeV-es bombázási energia mellett ki fog derülni, hogy mindkét tényező szerepéhez jut a reakció amplitúdó kialakításában: ez egyrészt a $^{16}\text{O}^*$ állapotok közismert nem „tiszt” szerkezete miatt, másrészt a gyenge abszorpció miatt lehetséges. A 2.3. fejezetben azonban ezt még figyelmen kívül hagyjuk, és a szokásos módon, a fenomenologikus DWBA keretén belül végezzük el a reakció számolást. A kapott eredményeknek a kísérleti értékekkel való összehasonlításából természetesen fog következni a mikroszkopikus módszer alkalmazásának szükségessége (2.4. fejezet).

E tárgyalásmódnak a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*$ reakcióra való alkalmazásához szükség van a $^{16}\text{O}^*$ állapotok α -spektroszkópiái amplitúdóira (ASA-ira), amelyeket a 3. fejezetben határozzunk meg. A számoláshoz a $^{16}\text{O}^*$ állapotokat realiztikusan leíró héjmodell hullámfüggvényeket fogunk használni. Az ASA programozható alakját a Függelékben vezetjük le, hogy a dolgozat olvasását megkönnyítsük. A 3.3. fejezetben viszont részletesen analizáljuk az ASA-k információtartalmát mind magreakció, mind magszerkezeti szempontból, összehasonlítjuk a rendelkezésre álló, más modellel kapott értékkel, valamint elvégezzük maguknak az ASA-knak a szerkezeti analizését, amely tartalmazza a magmérettől való függés vizsgálatát is.

Az ily módon részletesen megvizsgált ASA-kból kiválasztjuk a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d_{i=0-4})^{16}\text{O}^*$ átmenetekhez tartozó, az alkalmazott mikroszkopikus módszerrel történő leíráshoz szükséges 19 db ASA-t és a 4. fejezetben végrehajtjuk a mikroszkopikus reakciószámolást. A kapott eredmények igazolják a mikroszkopikus módszer előnyét a fenomenologikus módszerrel szemben.

Az 5. fejezet az összefoglalásé és a következtetéseké, ahol felhívjuk a figyelmet a módszer továbbfejlesztésének szükségességére.

Néhány megjegyzést kell még tenni a dolgozatbeli példa-reakció kiválasztásáról.

A mikroszkopikus módszer hasznosságát a transzfer reakciók egyik speciális esetén, az α -transzfer reakciók példáján mutatjuk be. A választás azért esett éppen az α -transzfer reakciókra, mert ez még éppen tárgyalható a rendelkezésre álló elméletekkel (és az ezekre kifejlesztett számítógép programokkal), ugyanakkor már elég sok (négy) nukleon átadásáról van szó ahhoz, hogy új típusú információkat nyerjünk a leírás során mind a végmag állapotait illetően, mind pedig a tárgyalásmód által felvetett általánosítás problémájával kapcsolatban. Ugyanakkor az α -részecske közismerten kompakt mag és kiemelkedő stabilitással rendelkezik. Ezért jó közelítéssel feltehető, hogy a négy nukleon egyszerre transzferálódik alapállapotban levő α -részecskeként. Ezzel a feltevéssel kihasználhatjuk az egynukleon transzfer reakciók elméleti tárgyalására kapott eredményeket s egyúttal kihangsúlyozódnak a legfontosabb különbségek az egynukleon és a cluster transzfer elméleti leírása között.

A sokféle α -transzfer reakció közül azért esett a választás a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*$ reakcióra, mert egyrészt a $^{12}\text{C}-^6\text{Li}$ kölcsönhatása szórásanalízisekből jól ismert, másrészt 20 MeV bombázó energián viszonylag gyenge az abszorpció, ami valószínűsíti a transzfer reakció maghoz közeli lejátszódását s ezáltal a mikroszkopikus módszer hatásosságát. Ugyanakkor a ^6Li mag jó közelítéssel [6, 7] α - d kötött állapot-

ként fogható fel s ezáltal az előbbi közelítés, miszerint a transzfert egyetlen α -részecske átadásaként fogjuk fel, még valószínűbbé válik.

Az oxigén 16-os izotópjára, mint végmagra, azért esett a választás, mert ez a mag mind kísérletileg, mind elméletileg a leginkább ismertek közé tartozik [4], ezenkívül a d-nal, a detektálendő részecskével való kölcsönhatása a szórás-kísérletek analízisének eredményeképpen szintén a legjobban tanulmányozottak közé tartozik.

Az alkalmazást azon α -transzfer átmenetekre mutatjuk be, amelyekben az ^{16}O mag 7,16 MeV α -bomlási küszöbenergia alatt fekvő állapotai népesülnek be. Öt ilyen nívót találunk [4]: $\text{O}_1^+(0,0)$, $\text{O}_2^+(6,05)$, $3_1^-(6,13)$, $2_1^+(6,92)$ és $1_1^-(7,12)$. A választás azért esett ezekre a nívókra, mert a mikroszkopikus reakciószámolásokhoz szükséges maghullámfüggvények az alacsony energiájú nívókra pontosabbak, mint a magasabb energiákon fekvő szintekre. Másrészt ezek az állapotok a szokásos α -bomlásos módszerrel [8] nem tanulmányozhatók, viszont α -részecskét magába-foglaló reakcióban való részvételük tanulmányozása — többek között asztrofizikai szempontból is [66] — igen fontos.

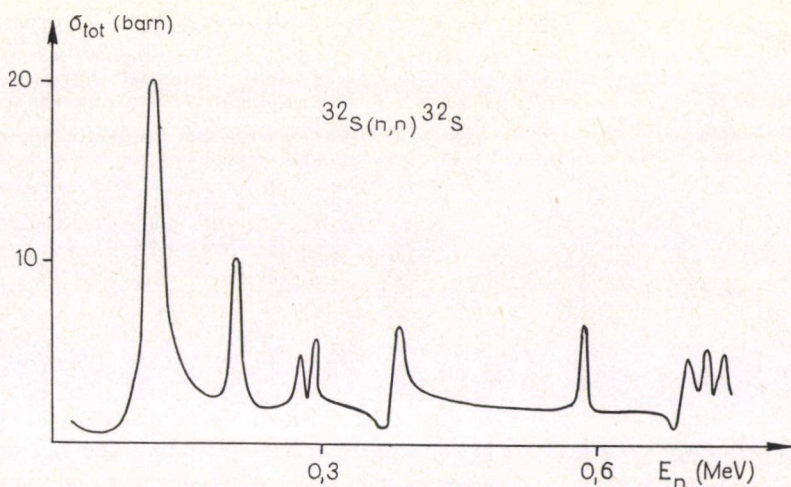
2. A cluster transzfer reakciók fenomenologikus leírása és a mikroszkopikus módszer elméleti megalapozása

2.1. Általános megjegyzések a magreakciókról és a transzfer reakciók információ-tartalmáról

Elvileg a magreakciók egzakt elméleti leírása a teljes magfizikai soktest probléma megoldását igényelné. Minthogy ez a probléma még könnyű ($A < 24$) atommagok esetén is meghaladja jelenlegi erőnket (nehéz magok esetén pedig fizikai képtelenség az egzakt megoldás kivitelezése), arra kell törekednünk, hogy a magreakciók elméletének olyan közelítését találjuk meg, amely a reakciók egyik vagy másik főbb jellegzetességét használja fel arra, hogy a jelenlegi technikai szintünkön kivitelezhető legyen a szóban forgó leírás.

E törekvés értelmében a magreakciókat két fő típusra oszthatjuk fel, úgymint: (i) közbenső-mag képződéssel járó magreakciók, (ii) közvetlen magreakciók.

A közbenső mag képződéssel járó (kompaund) reakciók két lépésben zajlanak le: először kialakul a közbenső mag, majd ez elbomlik, s a bomlásterméket detektáljuk. A közbenső mag kialakulásával járó reakciók hatáskeresztmetszete alacsony ($< 2\text{--}3$ MeV/nukleon) energiákon jelentős [54]. Magasabb energián ugyanis a nagyszámú nyitott csatorna lenyomja a kompaund hatáskeresztmetszetet. A 2/a ábrán egy tipikus közbenső mag képződéssel járó magreakció hatáskeresztmetszet görbéje látszik a bombázó energia függvényében. Az alacsony energiák mellett a hatáskeresztmetszetben talált keskeny rezonanciákat (Γ) éppen a közbenső mag relatív hosszú élettartamával (τ) lehet magyarázni ($\Gamma \sim 1/\tau$). Igen fontos információt szolgáltatnak a magreakciókról a reakciótermékek irány szerinti eloszlásai (szögeloszlás, differenciális hatáskeresztmetszet). Mivel a közbenső magból az emittált fragmentumokat azonos valószínűséggel várhatjuk az ellentétes irányokban, a detektált bomlástermék differenciális hatáskeresztmetszete (szögeloszlás görbéje) szimmetrikus a $\theta_{\text{CM}} = 90^\circ$ tömegközépponti rendszerbeli szórásszögre.



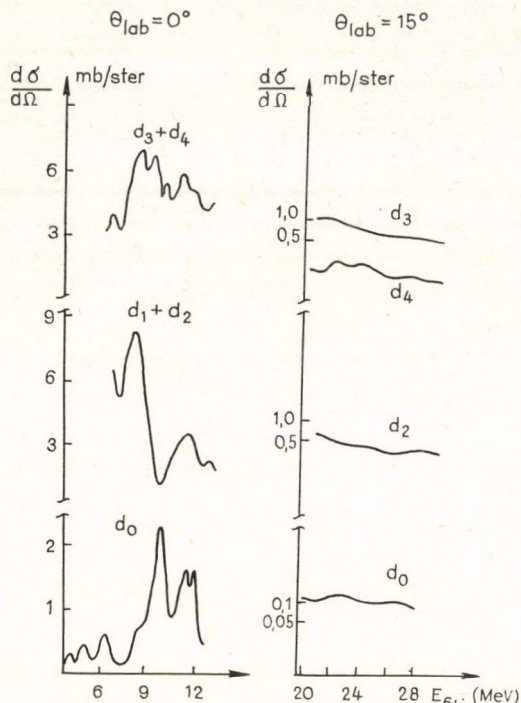
2/a. ábra. Közbenső-mag képződéssel járó reakció gerjesztési függvénye

A közvetlen (másképpen: direkt) reakciók egy vagy több lépésben mehetnek végbe. Közös jellemzőjük az, hogy nem alakul ki közbenső-mag és kevés szabadsági fok gerjed a reakció folyamán. A közvetlen reakciók magasabb energián ($>3-5$ MeV/nukleon) válnak dominánssá [17], olyan tartományban, ahol a közbenső-mag képződésen át vezető út valószínűsége lecsökken. Ezen reakciók hatáskeresztmetszete a bombázó energia függvényében simán változik, viszont differenciális hatáskeresztmetszete sokkal jellegzetesebb és változatosabb alakú, mint a közbenső magon át vezető reakcióé, mivel elsősorban az átadott impulzusmomentumtól függ.

A kompaund és direkt reakciók határesetek között más reakciómechanizmusok is vannak, pl. pre-equilibrium folyamatok, mélyen inelasztikus reakciók stb.

A kompaund vagy direkt mechanizmus kérdést példareakciónk esetében legegyszerűbben a teljes hatáskeresztmetszet energiafüggésének vizsgálatával lehet eldönteni. A mérések azt mutatják, hogy alacsony bombázó energián ($E_{0Li} = 5-12$ MeV) a hatáskeresztmetszet erősen oszcillál [70], míg 20 MeV körüli energián meglehetősen sima lefutású [71] (l. 2/b. ábra). Mindez reményt nyújt arra, hogy a minta-példának választott transzfer reakciók esetében a direkt mechanizmus erősebb a kompaundnál s ezért a differenciális hatáskeresztmetszetben mutatkozó csúcsokat, illetve főbb jellegzetességeket (l. 2.3. fejezet) a direkt mechanizmus alakítja ki.

Az ötvenes évek végén és a hatvanas években, mind kísérletileg, mind elméletileg csupán a transzfer reakciók legegyszerűbb változatának, az egynukleon transzfer reakciók tanulmányozására volt meg a lehetőség. Ezekben az években igen intenzív munka indult meg az egynukleon transzfer reakciók elméletének kifejlesztésére [1]. Ugyanakkor nagyszámú kísérletet is elvégeztek különböző atommagokon [2, 19]. Ezeknek a munkáknak a háttérében az az izgalmas cél látszott, hogy információt kaphatunk az atommag hullámfüggvényének bizonyos „részeiről”, s ennek megfelelően dönthetünk bizonyos modellek jósága, teljesítőképessége felől. Mindez azért lehetséges, mert az elmélet egynukleon transzfer esetén bizonyos megfigyelési



2/b. ábra. A $^{13}\text{C}(^6\text{Li}, d_1)^{16}\text{O}^*$ átmenetek gerjesztési függvénye

adatokat (a spektroszkópiai faktórokat) egyértelmű összefüggésbe hozza az atommagok állapotát jellemző hullámfüggvénnyel. Ily módon az egynukleon transzfer reakciók kiválóan alkalmasak a transzfer folyamat révén létrejövő ún. maradék-mag egynukleon szerkezetének tanulmányozására. Ilyen szerkezettel rendelkeznek általában a zárthéj+egynukleon felépítésű magok (pl. ^{17}O), amelyek energiaállapotai sok esetben leírhatók az extrém egyrészescske héjmodell [3] segítségével. A transzfer reakciók elmélete természetesen magába foglalja a magszerkezet elméletét, mivel igényli a reakcióban résztvevő magok hullámfüggvényeit. A magszerkezeti információ kinyerése elméleti szempontból oly módon történik, hogy a reakcióelmélet által megadott spektroszkópiai mennyiségeket egy magmodell keretén belül kiszámoljuk és összehasonlítjuk a kísérletileg mért értékekkel.

Amennyiben egyezést érünk el az adott reakció minden adatára, akkor a magmodell jó, helyesen írja le a reakcióban résztvevő magokat. Amennyi-

nyiben viszont nem kielégítő az egyezés, más modellt kell keresni és — ^{17}O példánknál maradva — a zárthéj+egynukleon feltevés nem érvényes többé a szóban forgó végállapotra.

Ahhoz, hogy kísérleti szempontból fogalmat alkothassunk az ilyen „eltérő” állapotok felépítéséről, általában az szükséges, hogy olyan többnukleont átadó *magreakciót* hozzunk létre, amely ugyanezen („eltérő”) végállapotra vezet. Ha azt találjuk pl., hogy a vizsgált állapot (legyen ez az ^{17}O 7,7 MeV energiájú $11^{-}/2$ spinparitású állapota) kétnukleon transzferrel sokkal erősebben gerjeszthető, mint egynukleon transzferrel (pl. (d, p) -vel), akkor nagy valószínűséggel feltételezhetjük, hogy ennek az állapotnak 2 részecske – 1 lyuk szerkezete van, szemben a korábban feltételezett 1 részecske – 0 lyuk (\equiv zárthéj) szerkezettel. Tehát az egynukleon transzfer reakciók által könnyen benépesíthető 1 részecske – 0 lyuk szerkezetű állapot helyett ebben az esetben a 2 részecske – 1 lyuk felépítésű állapottal találkoztunk.

Ezen a (valóságos [4]) példán keresztül megállapíthatjuk tehát, hogy a transzfer reakciók információt szolgáltatnak az atommag szerkezetére vonatkozóan. Azt is lesűrítjük az említett példából, hogy különböző számú nukleon transzferekkel általában különböző, de meghatározott karakterrel rendelkező állapotokat lehet létrehozni. Általában n -nukleon transzfer esetén azok az állapotok népesülnek be, amelyekben n -nukleonból álló csoport(ok) „szeretnek” kialakulni. Azt mondjuk

ilyenkor, hogy ezekben az állapotokban az n -nukleon korreláció erős. Itt n -nukleon korreláció alatt azt értjük, hogy n számú nukleonból álló csoportok, „szigetek” vannak a magban ténylegesen. (Tehát a korreláció fogalma itt mást jelent, mint a két-nukleon kölcsönhatás által létrehozott magbéli kétnukleon korreláció, amely többek között abban nyilvánul meg, hogy az erős, rövid távolságon vadul taszító kétnukleon kölcsönhatást olyan effektív kölcsönhatássá szelídíti a magban, amely a mag héjszerkezetének kialakulását is lehetővé teszi [5].) Mivel a példáinkban ténylegesen nukleoncsoport átadásáról van szó, korreláció alatt térbeli együttlevésre (cluster szerkezetre) gondolhatunk. Ezért, durván szólva, d, t, α, \dots s.í.t., csoportok jelenlétét képzelhetjük el egy adott állapotban, ha az könnyen létrehozható d, t, α, \dots s.í.t., nukleoncsoportok transzferjével.

A vizsgált állapot felépítéséről *elméletileg magszerkezet* számolás révén alkotunk magunknak fogalmat. Pl. elvégzünk egy olyan héjmodell számolást, amelyben több nukleon lehet „aktív”, azaz különböző, előre megadott egyrészcseke héjakon helyezkedhetnek el kölcsönhatva egymással és a törzzsel. Legyen pl. ^{12}C a törzs, amely körül a $0p_{1/2}, 1s_{1/2}, 0d_{5/2}$ egyrészcseke héjakon öt nukleon mozoghat. Amennyiben héjmodellünk a számolás elvégzése után kiállta a gyakorlat próbáját, és azt találjuk, hogy a $11/2^-$ -os állapot konfigurációs együtthatója közül pl. a $((d_{5/2})^2 (p_{1/2})^{-1}) (11/2)$ konfigurációhoz tartozó együttható a domináló, akkor ez az eredmény nyilvánvalóan nagymértékben megerősíti a kétnukleon transzfer reakciókból nyert azon feltételezést, hogy ez a ^{17}O állapot 2-részcseke – 1-lyuk jellegű.

2.2. A módszer elméleti alapjai

A továbbiakban végig feltesszük, hogy a kétrészcsekes csatornák járuléka a fontos, azaz olyan reakciókkal foglalkozunk, ahol a bemenő csatorna és a kijövő csatornák két magot tartalmaznak.

Tekintsünk egy olyan rendszert, amely két atommagból áll, s ütközzenek ezek az atommagok egymással. Ekkor egy olyan tértartományban, amely elegendően távol van a rendszer tömegközéppontjától, a rendszer hullámfüggvényének aszimptotikus alakja [1] nyomán a következőképpen írható:

$$\Psi_{\alpha i}^{(+)}(\mathbf{K}_{\alpha i}) \rightarrow \chi_{\alpha i} e^{i\mathbf{K}_{\alpha i} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} - \sum_{\beta j} T_{\alpha i, \beta j}(\mathbf{K}_{\alpha i}, \mathbf{K}_{\beta j}) \frac{M_{\beta}}{2\pi\hbar^2} \chi_{\beta j} \frac{e^{i\mathbf{k}_{\beta j} \cdot \mathbf{r}_{\beta}}}{r_{\beta}}, \quad (1)$$

ahol αi azonosítja a csatornákat oly módon, hogy α jelöli a nukleonok eloszlását az A_{α} és B_{α} mag között, és i jellemzi ezen két mag belső mozgását. \mathbf{r}_{α} az A_{α} és B_{α} magok közötti távolság és $\hbar\mathbf{K}_{\alpha i}$ a relatív impulzus e két mag között.

A rendszer teljes Hamilton-operátora (H) minden αi csatorna esetén három részre bontható:

$$H = H_{A_{\alpha}} + H_{B_{\alpha}} + T_{\alpha} + V_{\alpha} = H_{\alpha} + T_{\alpha} + V_{\alpha}, \quad (2)$$

ahol $H_{A_{\alpha}}$ és $H_{B_{\alpha}}$ az A_{α} és B_{α} mag belső mozgását írja le, T_{α} és V_{α} pedig a két mag relatív kinetikus energia- és kölcsönhatási operátora. Az (1) egyenletben szereplő $\chi_{\alpha i}$ hullámfüggvény H_{α} sajátfüggvénye.

A rendszerre vonatkozó Schrödinger-egyenletek a következők:

$$(E - H) \Psi_{\alpha i}^{(+)}(\mathbf{K}_{\alpha i}) = 0, \quad (3a)$$

$$(E_{\alpha i} - H_{\alpha}) \chi_{\alpha i} = 0. \quad (3b)$$

Az energiák között a következő összefüggések állnak fenn:

$$E = E_{\alpha i} + \frac{\hbar^2 K_{\alpha i}^2}{2M_{\alpha}} = E_{\beta j} + \frac{\hbar^2 K_{\beta j}^2}{2M_{\beta}} = \dots \quad (4)$$

ahol M_{α} az αi csatornabeli redukált tömeg.

Az (1) egyenletben szereplő $T_{\alpha i, \beta j}(\mathbf{K}_{\alpha i}, \mathbf{K}_{\beta j})$ mennyiséget szórási amplitúdónak hívjuk s ezzel az $\alpha i \rightarrow \beta j$ reakció differenciális hatáskeresztmetszete a következő módon fejezhető ki [10]

$$\frac{d\sigma_{\alpha i, \beta j}}{d\Omega} = \frac{M_{\alpha} M_{\beta}}{(2\pi\hbar^2)^2} \frac{K_{\beta j}}{K_{\alpha i}} |T_{\alpha i, \beta j}|^2. \quad (5)$$

Az eddigi általános igazságok akkor telnek meg használható tartalommal, ha sikerül megtalálnunk a reakciók létrejöttéért felelős $V_{\alpha}, V_{\beta}, V_{\gamma} \dots$ kölcsönhatási potenciálok és a $T_{\alpha i, \beta j}, T_{\alpha i, \gamma k}, \dots$ szórásamplitúdók közötti összefüggést.

Ezt a kapcsolatot először Gell-Mann és Goldberger találta meg [9] 1952-ben s azóta többen is értelmezték és általában a „kétpotenciális formula” névvel illetik [1, 40, 60]. Eszerint a direkt reakció átmeneti (v. szórás) amplitúdója a következő alakban írható fel:

$$T_{\alpha i, \beta j}(\mathbf{K}_{\alpha i}, \mathbf{K}_{\beta j}) = \langle \Phi_{\beta j}^{(-)}(\mathbf{K}_{\beta j}) | V_{\beta} - \bar{V}_{\beta} | \Psi_{\alpha i}^{(+)}(\mathbf{K}_{\alpha i}) \rangle, \quad (6a)$$

ahol a

$$\Phi_{\beta j}^{(-)}(\mathbf{K}_{\beta j}) \equiv \chi_{\beta j} \Phi_{\beta j}^{(+)}(-\mathbf{K}_{\beta j}, \mathbf{r}_{\beta})^* \quad (6b)$$

hullámfüggvény a

$$\bar{H}_{\beta}^{+} = H + \bar{V}_{\beta}^{+} - V_{\beta} = H_{\beta} + T_{\beta} + \bar{V}_{\beta}^{+} \quad (6c)$$

Hamilton-operátor sajátfüggvénye, ahol $\bar{V}_{\beta}(\mathbf{r}_{\beta})$ egy tetszőlegesen választható, belső magkoordinátáktól nem függő modellpotenciál. \bar{V}_{β} választásával szemben (6a) invariáns [1, 60].

$|T_{\alpha i \rightarrow \beta j}|^2$ nyilvánvalóan annak valószínűségét adja meg, hogy a magfizikai rendszer az egzakt $\Psi_{\alpha i}$ kétrészecske-rendszer állapotból a $V_{\beta} - \bar{V}_{\beta}$ kölcsönhatás révén közvetlenül a „jól választott” $\Phi_{\beta j}$ modell állapotba menjen át.

Mindeddig feltettük, hogy a reakcióban részt vevő magok nukleonjai megkülönböztethetők egymástól, azaz nem vettük figyelembe a Pauli-elvet. A Pauli-elv megkövetelte antiszimetrizáció a $\Psi_{\alpha i}^{(+)}$ hullámfüggvényre formálisan könnyen kielégíthető, gyakorlatilag azonban csaknem keresztülvihetetlen. Formális megfontolásból az adódik [1], hogy a Pauli-elv hatása úgy vehető figyelembe, ha kiszámítjuk (6a) amplitúdókat az összes lehetséges permutációra, majd ezeket az amplitúdókat a permutáció paritásával megszorozva összeadjuk. A legtöbb esetben azonban a permutációs tagok kicsik a direkt taghoz képest [1].

Meg kell jegyezni, hogy (6a) kiszámítása nem jelent kisebb feladatot, mint a Schrödinger-egyenlet megoldása. Ezért szükségképpen közelítéseket kell bevezetni. A leggyakrabban használt közelítés direkt magreakciókra a torzított-hullámú Born-közelítés, amely gyenge átmenetek esetén érvényes, s így mi is vehetjük kiindulási alapul. A torzított hullámú Born-közelítés (DWBA) közvetlen magreakciókra abban áll, hogy:

(i) (6a)-ban \bar{V}_{β} -t a β csatornabeli U_{β} optikai potenciállal helyettesítjük (ekkor kapjuk $\Phi_{\beta j}$ -re (6c) szerint a torzított hullámokat);

(ii) ugyancsak (6a)-ban a $\Psi_{ai}^{(+)}$ függvényt $\Phi_{ai}^{(+)}$ függvénnyel helyettesítjük (ez a Born-közelítés).

Ezek szerint a DWBA átmeneti amplitúdó közvetlen reakciókra a következő:

$$T_{ai \rightarrow \beta j}^{DWBA} = \langle \Phi_{\beta j}^{(-)}(\mathbf{K}_{\beta j}) | V_{\beta} - U_{\beta} | \Phi_{ai}^{(+)}(\mathbf{K}_{ai}) \rangle. \quad (7)$$

A (7) alatti DWBA amplitúdó — a Born-közelítés bevezetése miatt — már nem invariáns U_{β} választásával szemben. Kimutatható [60], hogy ha U_{β} -t valóban a szórás kísérletekből nyert optikai potenciállal azonosítjuk, akkor csökkentjük legnagyobb mértékben a Born-közelítés okozta hibát.

A továbbiakban a (7) alatt felírt amplitúdót fogjuk az x -cluster transzfer leírására alkalmazni és lépésről lépésre olyan alakra hozni, amelyben kidomborodik a magszerkezet szerepe és fellépnek a transzfer reakciókban használatos fogalmak. A levezetés során ugyanakkor eljutunk azokhoz a képletekhez, amelyek a kétnukleon ($x=2$) transzfer reakciók elméletéből (l. pl. [27]) is ismeretesek.

Az

$$A + \underbrace{(b+x)}_a \rightarrow \underbrace{(A+x)}_B + b \quad (8)$$

x -nukleon transzfer reakció esetén (7) a következőképpen is írható

$$T_{Aa \rightarrow Bb}^{DWBA} = \langle \Phi_{Bb}^{(-)}(\mathbf{K}_{Bb}) | V_{Bb} - U_{Bb} | \Phi_{Aa}^{(+)}(\mathbf{K}_{Aa}) \rangle. \quad (9)$$

Ez részletesebben kiírva a következő 6-dimenziós integrál meghatározását jelenti (a levezetés során — a könnyebb áttekinthetőség kedvéért — eltekintünk az impulzus momentum csatolási állandók explicit feltüntetésétől)

$$T_{Aa \rightarrow Bb}^{DWBA} = \int d\mathbf{r}_{Bb} d\mathbf{r}_{Aa} \Phi_{Bb}^{(-)*}(\mathbf{K}_{Bb}, \mathbf{r}_{Bb}) F(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) \Phi_{Aa}^{(+)}(\mathbf{K}_{Aa}, \mathbf{r}_{Aa}), \quad (10)$$

ahol a $\Phi_{Yy}^{(\pm)}$ torzított hullámot (6.b)-vel és (6.c)-vel összhangban az

$$(\varepsilon_{Yy} - T_{Yy} - U_{Yy}) \Phi_{Yy}^{(\pm)} = 0 \quad (11)$$

szórási Schrödinger-egyenlet írja le kifutó (+), ill. befutó (−) aszimptotikával, és az egyenletben szereplő koordináták összefüggéseit a 3. ábráról olvashatjuk le.

A (10) egyenletben szereplő F függvényt a reakció „alakfaktorának” nevezzük. Az alakfaktor tartalmazza a reakcióban résztvevő magok hullámfüggvényeit, valamint az átmenetet létrehozó kölcsönhatást. (6.c) felhasználásával, valamint (10) (9)-hez való hasonlításával az alakfaktor meghatározása a következő mátrixelem kiszámítását igényli:

$$F(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) = \langle \chi_{Bb} | V_{Bb} - U_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle \quad (12)$$

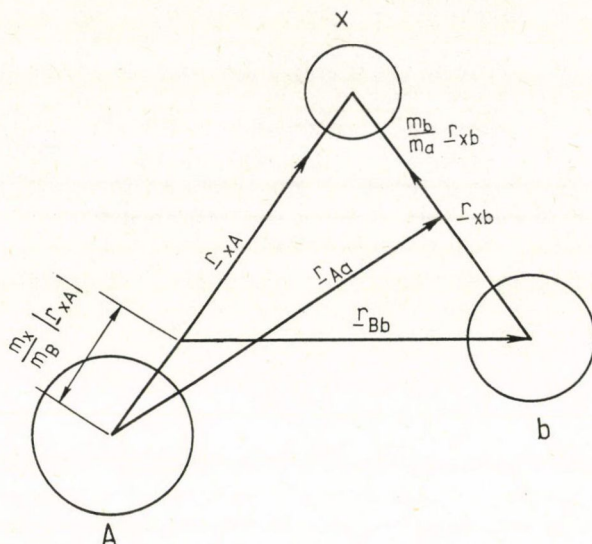
ahol az integrálás kiterjesztendő az A, b „core”-ok, valamint az x -nukleoncsoporsíki koordinátáira és a χ_{Yy} mag belső hullámfüggvényeket (3b) értelmében

$$(E_{Yy} - H_Y - H_y) \chi_{Yy} = 0 \quad (13)$$

határozza meg.

Foglalkozzunk először (12) második tagjával. Mivel az $U_{Bb}(r_{Bb})$ optikai potenciál nem függ a magok belső koordinátáitól,

$$\langle \chi_{Bb} | U_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle = U_{Bb} \langle \chi_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle. \quad (14)$$



3. ábra. A (10) egyenletben szereplő koordináták összefüggései

Mivel (9)-ben az előbb mondottak értelmében a részecskék megkülönböztethetők, $\chi_{Bb} = \chi_B \chi_b$ írható, ahol (13)-hoz hasonlóan χ_y -t az

$$(E_y - H_y) \chi_y = 0, \quad (15)$$

Schrödinger-egyenletből határozzuk meg. Így a (14)-beli mátrixelem a következő módon alakítható tovább:

$$\begin{aligned} \langle \chi_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle &= \langle \chi_B \chi_b | \chi_A \chi_a \rangle = \sum_x \langle \chi_B | \chi_A \chi_x \rangle \\ x \langle \chi_a | \chi_b \chi_{x'} \rangle^* &\equiv \sum_{x'} F_{x'A}(\mathbf{r}_{xA}) F_{x'b}(\mathbf{r}_{xb}), \end{aligned} \quad (16)$$

ahol az összegezés az x -részecske összes belső állapotára kiterjesztendő, és az F_{xA}, F_{xb} , az ún. „ x -részecske $B(a)$ magbéli alakfaktora” jelölést az

$$F_{xA}(\mathbf{r}_{xA}) \equiv \langle \chi_B | \chi_A \chi_x \rangle \quad (17a)$$

$$F_{xb}(\mathbf{r}_{xb}) \equiv \langle \chi_a | \chi_b \chi_x \rangle \quad (17b)$$

definíciókkal vezettük be. Mivel az x -részecske alakfaktor valós mennyiség, (17b)-ben a csillagot elhagytuk.

Bevezetjük a „ B mag x -részecske spektroszkópiai amplitúdója” fogalmat [30, 31] a következő definícióval:

$$F_{xA}(\mathbf{r}) = \sum_{NL} A_{NL}(B \rightarrow A + x) \varphi_{NL}(\mathbf{r}), \quad (18a)$$

ahol a $\{\varphi_{NL}\}$ ortonormált függvényrendszer az $\{A, x\}_{NL}$ kötött állapot relatív mozgását írja le, és a B mag x -részecske spektroszkópiai amplitúdója,

$A_{NL}(B \rightarrow A+x)$, az

$$A_{NL} = \langle F_{xA} | \varphi_{NL} \rangle \equiv \langle \chi_B | \chi_A \chi_x \varphi_{NL} \rangle \quad (18b)$$

összefüggésből határozható meg. N, L az $\{A-x\}$ rendszer relatív mozgásának kvantumszámait jelöli.

(14) tehát a következő módon írható:

$$\langle \chi_{Bb} | U_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle = U_{Bb} \sum_{NLN'L'} A_{NL}(B \rightarrow A+x') A_{N'L'}(a \rightarrow b+x') \varphi_{NL}(\mathbf{r}_{xA}) \varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}). \quad (19)$$

Foglalkozunk most (12) első tagjával. Ez az előzőekben megismert módszerrel és jelölésekkel a következőképp alakítható (V_{Bb} tartalmaz belső koordinátákat!):

$$\langle \chi_{Bb} | V_{Bb} | \chi_{Aa} \rangle = \sum_{\substack{NLN'L'x' \\ x''A'b'}} V_{Bb}^{\text{eff}} A_{NL}(B \rightarrow A'+x') A_{N'L'}(a \rightarrow b'+x'') \varphi_{NL}(\mathbf{r}_{xA}) \varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) \quad (20)$$

ahol az effektív kölcsönhatás B és b között a következő formákban írható:

$$\begin{aligned} V_{Bb}^{\text{eff}}(A'x'x''b') &\equiv \langle \chi_{A'} \chi_{x'} \chi_b | V_{Bb} | \chi_A \chi_{b'} \chi_{x''} \rangle = \langle \chi_{A'} \chi_{x'} \chi_b | V_{Ab} | \chi_A \chi_{x''} \chi_{b'} \rangle + \\ &+ \langle \chi_{A'} \chi_{x'} \chi_b | V_{xb} | \chi_A \chi_{x''} \chi_{b'} \rangle \equiv \delta_{x'x''} V_{Ab}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xA} + \mathbf{r}_{xb}) + \delta_{AA'} V_{xb}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xb}). \end{aligned} \quad (21)$$

(20) és (19) felhasználásával a (12) alatti alakfaktor

$$F(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) = \sum_{\substack{NLN'L'x' \\ x''A'b'}} A_{NL}(B \rightarrow A'+x') A_{N'L'}(a \rightarrow b'+x'') f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xA}, \mathbf{r}_{xb}) \quad (22a)$$

ahol $f_{NLN'L'}$, a *fenomenologikus* DWBA elméletben használt szokásos alakfaktor, a következő:

$$f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xA}, \mathbf{r}_{xb}) = \varphi_{NL}(\mathbf{r}_{xA}) [V_{Bb}^{\text{eff}} - \delta_{x'x''} \delta_{A'A} \delta_{b'b} U_{Bb}] \varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}). \quad (22b)$$

Általában a $B \rightleftharpoons \{A' + x'\}_{NL}$ és ugyanígy az $a \rightleftharpoons \{b' + x''\}_{N'L'}$ „átmeneteknek” vagy „bomlásoknak” megfelelő x -részecske spektroszkópiai amplitúdók közül azok a legnagyobbak, amelyekben a fragmentumok alapállapotban vannak. Különösen igaz ez akkor, ha az x fragmentum egy α -részecske (melynek igen magasan, kb. 20 MeV körül van az első gerjesztett nivója) és a „ b ” fragmentum egy d (melynek csak egy kötött állapota létezik). Ez azt jelenti, hogy (22a)-t közelíthetjük az

$$F(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) = \sum_{NLN'L'} A_{NL}(B \rightarrow A+x) A_{N'L'}(a \rightarrow b+x) f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) \quad (23a)$$

egyenlettel, ahol most már

$$f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) = \varphi_{NL}(\mathbf{r}_{xA}) (V_{Bb}^{\text{eff}} - U_{Bb}) \varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) \quad (23b)$$

és az effektív kölcsönhatás (21) diagonális részével egyenlő:

$$V_{Bb}^{\text{eff}} = \langle \chi_A \chi_x \chi_b | V_{Bb} | \chi_A \chi_b \chi_x \rangle, \quad (23c)$$

Mivel U_{Bb} szerepe az, hogy a számolást könnyen kezelhetővé és a Born-közelítés bevezetését lehetővé tegye, könnyen belátható, a $V_{Bb}^{\text{eff}} - U_{Bb}$ kölcsönhatás rövidtávolságú. Az is belátható, hogy ez főként az a -magbéli V_{xb}^{eff} effektív kölcsön-

hatásból származik [60]. Így (23b) tovább alakítható:

$$f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) = \varphi_{NL}(\mathbf{r}_{xA}) V_{xb}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xb}) \varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) \quad (23d)$$

Írjuk (10)-ben F helyett a (22b) alatti f -et! Ekkor kapjuk a

$$B_{NL}^{N'L'}(\theta) \equiv \int d\mathbf{r}_{Bb} d\mathbf{r}_{Aa} \Phi_{Bb}^{(-)*}(\mathbf{K}_{Bb}, \mathbf{r}_{Bb}) f_{NLN'L'}(\mathbf{r}_{xb}, \mathbf{r}_{xA}) \Phi_{Aa}^{(+)}(\mathbf{K}_{Aa}, \mathbf{r}_{Aa}) \quad (24)$$

fenomenologikus DWBA szórási amplitúdót.

(22) (10)-be való írásával és (24) kihasználásával, az azonos átalakítások végeredményeként azt kapjuk, hogy az $Aa \rightarrow Bb$ transzfer folyamatot leíró

$$T_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{DWBA}} = \sum_{\substack{NN'LL' \\ A'b'x'x''}} A_{NL}(B \rightarrow \{A' + x'\}_{NL}) A_{N'L'}(a \rightarrow \{b' + x''\}_{N'L'}) B_{\{A'+x'\}_{NL}}^{\{b'+x''\}_{N'L'}}(\theta) \quad (25)$$

átmeneti (szórás) amplitúdó olyan amplitúdók *koherens* (interferáló tagok) összegeként állítható elő, amelyek kizárólag vagy megszerkezeti ($A_{NL}, A_{N'L'}$), vagy *dinamikai* ($B(\theta)$) információt hordoznak. (A (25)-beli $B(\theta)$ amplitúdót (22b) (24)-be való helyettesítésével kapjuk.)

Az eddigi átalakítások haszna szembeszökő. A szintén szemléletes (7) kifejezés (25) alatt olyan változatban áll előttünk, amely világosan mutatja az $Aa \rightarrow Bb$ átalakulás fizikailag is várható folyamatát. (25)-ben ugyanis egy tag azt jelenti, hogy az „összetett” B és a atommagban $|A_{NL}(B)|^2$, illetve $|A_{N'L'}(a)|^2$ „valószínűséggel” megtalálható a befogadandó, ill. az átadandó x nukleonscsoport az A , ill. b core-okhoz viszonyított adott relatív állapotban. Az így specifikált x -cluster átadásáról ezután a $B(\theta)$ dinamikai amplitúdó úgy ad számot, mintha a reakcióban résztvevő magok szerkezettel nem rendelkeznének. Világosan látszik az is a (24) és (25) alatti felírásokból, hogy a fenomenologikus közelítés két esetben alkalmazható:

1. vagy amikor a kinematikai-dinamikai viszonyok (a $\Phi^{(+/-)}$ függvények) olyanok, hogy (24)-ben f -nek csak a core-októl nagy távolságra levő részei adnak járulékot az integrálhoz. Ebben az aszimptotikus tartományban f menete ugyanis nem nagyon függ a radiális csomópontszám (N) értékétől s így az erre való összegzés jó közelítéssel csak egy konstans tényezőt eredményez. (Az impulzus momentum kvantumszámokra vonatkozó összegzés korlátozott, mert ezekre megmaradástétel érvényes; ráadásul, ha az x -nukleonscsoport spinje 0, akkor L, L' meghatározott);

2. vagy amikor (25)-ben csak egyetlen $A_{NL} A_{N'L'}$ spektroszkópiai amplitúdó pár járulékot a fontos, azaz amikor a „ B ” és „ a ” összetett magok állapotai „tiszta”.

A megszerkezet és reakciódinamika szétválaszthatóságának nagy előnye nemcsak a szemléletességben nyilvánul meg; lehetőség nyílik ezáltal a (7) alatti reménytelennek tűnő feladat egzakt megvalósítására is. (25) ugyanis az elméleti magfizika két legjobban kifejlesztett „fegyverével” vehető célba: a szerkezet- és reakciószámolással. Ezek szerint a szerkezetszámolás feladata lenne a különféle „ A ” spektroszkópiai amplitúdók számolása, míg a reakciószámolás szolgáltatná a „ $B(\theta)$ ” kinematikai-dinamikai amplitúdókat.

Az irodalmat tanulmányozva, meggyőződhetünk arról [12, 14, 16], hogy a közvetlen reakciókkal kapcsolatos általános gyakorlat a $B(\theta)$ amplitúdó egy esetre való egzakt kiszámolása. „Egy eseten” azt a (25)-beli legvalószínűbb tagot értik, amely az A', b', x' gerjesztések elhanyagolásával és a naív (egyrészecske) héj-

modell alkalmazása révén adódik. Ekkor N, L, N', L' is meghatározott értékeket vesz fel, és (25)-ből úgy nyerhető az átmeneti amplitúdó, hogy elhagyjuk az összegezést:

$$T_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{FDWBA}} = A_{NL}(B \rightarrow A+x)A_{N'L'}(a \rightarrow b+x)B_{NL}^{N'L'}(\theta). \quad (26a)$$

Ebben a közelítésben természetesen a hatáskeresztmetszet (5) alatti kifejezése is faktorizálódik egy magszerkezeti és egy reakciódinamikai részre:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{FDWBA}} = S(B \rightarrow A+x)S(a \rightarrow b+x)\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{elm}} \quad (26b)$$

ahol az S *spektroszkópiai faktor* a spektroszkópiai amplitúdó négyzetével egyenlő,

$$S(B \rightarrow A+x) \equiv |A_{NL}(B \rightarrow A+x)|^2 \quad (27)$$

és a $(d\sigma/d\Omega)_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{elm}}$ elméleti differenciális hatáskeresztmetszet a dinamikai amplitúdó négyzetéből adódik, azaz:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Aa \rightarrow Bb}^{\text{elm}} \sim |B_{NL}^{N'L'}(\theta)|^2 \quad (28)$$

(26b) a fenomenologikus DWBA-elmélet (FDWBA) által szolgáltatott kifejezés a reakció hatáskeresztmetszetére. Mint látjuk, lényege abban áll, hogy egyetlen szorzó faktorba sűríti bele a magszerkezeti információt. (26)-tól való megkülönböztetésül (25)-öt „*mikroszkopikus*” DWBA-elméletnek (MDWBA) hívjuk.

A (26) FDWBA tehát nagyon vonzó abban a tekintetben, hogy lehetőséget kínál a különböző magmodell, magszerkezet számolások közvetlen mérési ellenőrzésére. Ha ugyanis a FDWBA kielégítő (a mérési hibákon belüli) pontossággal adja vissza a kísérleti differenciális hatáskeresztmetszetet, akkor (26b) teljes térszögre való integrálásával a

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{mérés}} = \sigma_{\text{tot}}^{\text{FDWBA}} = S(B \rightarrow A+x)S(a \rightarrow b+x)\sigma_{\text{tot}}^{\text{elm}} \quad (29a)$$

összefüggést kapjuk.

Mármost különböző B, B^* végállapotok esetére megmérve a reakció hatáskeresztmetszetét, az alábbi módon

$$\frac{\sigma_{\text{tot}}^{\text{mérés}}(Aa \rightarrow B^*b)}{\sigma_{\text{tot}}^{\text{mérés}}(Aa \rightarrow Bb)} = \frac{\sigma_{\text{tot}}^{\text{elm}}(Aa \rightarrow Bb)}{\sigma_{\text{tot}}^{\text{elm}}(Aa \rightarrow B^*b)} = \frac{S(B^* \rightarrow A+x)}{S(B \rightarrow A+x)} \quad (29b)$$

kísérletileg határozhatjuk meg a spektroszkópiai faktorok arányát. Amennyiben a $B(\theta)$ amplitúdók számolása egzakt és az egyszerű héjmodell alapján nyert fenomenologikus közelítés alkalmazható, (29b)-vel valóban az elméleti úton is számolható spektroszkópiai faktorok arányát mértük ki. Ezáltal az elméleti magmodellek tesztelésére újabb módszer került birtokunkba.

Az irodalomban többször találkozhatunk azzal a definícióval, hogy a spektroszkópiai faktor nem más, mint az alakfaktor normájának a négyzete. Ezt a definíciót a (22a), ill. (23a) egyenlet és a fenomenologikus közelítésről mondottak is indokolják. Ilyen módon tehát a spektroszkópiai faktor definíciója egyértelmű. Azonban, az eddigiek alapján világosan kell látnunk azt a tényt is, hogy a spektroszkópiai faktort mindig valamilyen modellből számítjuk ki, tehát a gyakorlatban a spektrosz-

kópiái faktorok modellfüggők. Így pl. a kísérletekből extrahált ún. kísérleti spektroszkópiái faktor (S_{exp}) értékek mögött mindig valamilyen fenomenologikus modell húzódik, míg az elméleti spektroszkópiái faktorokat (S_{elm}) mindig valamilyen (többé-kevésbé) mikroszkopikus magmodellből határozzuk meg. Tehát az elméleti és kísérleti spektroszkópiái faktor elvben különbözik egymástól. A gyakorlatban azonban megegyezhetnek, ha a fenomenologikus közelítés jó. (Pl., ha az alakfaktor-nak csak az aszimptotikája ad járulékot a $B(\theta)$ -ban levő a radiális integrálokhoz. Azonban elvben még ebben az esetben is figyelemmel kellene lennünk az alakfaktor belső viselkedésére [73], mert az aszimptotika nagyságára a belső tartomány is hatással van.) A spektroszkópiái faktorok meghatározásában levő bizonytalanságok, különbözőségeik miatt igen körültekintően és óvatosan kell kezelnünk a rájuk vonatkozó irodalmi adatokat. Meg kell jegyezni még, hogy a spektroszkópiái faktorok terén levő bizonytalanságokra már Borbély Imre is utalt közvetve egyik publikációjában [75].

A $B(\theta)$ dinamikai amplitúdó számolására többféle közelítést és ezeknek megfelelő computer kódot fejlesztettek ki [13, 14, 15].

Legelterjedtebb és legfontosabb ezek közül az ún. *zérus hatótávolságú* (ZR) közelítés. Alkalmazására akkor van mód, ha az $\{x+b\}_{N'L'}$ rendszer relatív impulzusmomentuma zérus ($L'=0$). Ekkor ugyanis a (23d) alatti alakfaktort tovább egyszerűsíthetjük a

$$V_{xb}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xb})\varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) = D_0\delta(\mathbf{r}_{xb}) \quad (30a)$$

ZR közelítés bevezetésével, amely a (24)-beli DWBA amplitúdóbeli hatdimenziós integrálást három dimenziósra csökkenti. Az \mathbf{r}_{xb} szerinti integrálást és az összes információt a transzfer okozó kölcsönhatásról a D_0 , az ún. ZR konstans sűríti magába, amelyet a

$$\int V_{xb}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xb})\varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) d\mathbf{r}_{xb} = D_0 \quad (30b)$$

integrál definiál.

A (30a) alatti közelítés bevezetésére az adja az indítékot, hogy az $L'=0$ pályamomentumú relatív mozgást leíró hullámfüggvényt (amely véges értékkel rendelkezik az origóban) egy rövidhatótávolságú V_{xb} effektív nukleáris potenciállal (amely gyorsan levág) megszorozva, a

$$D(\mathbf{r}_{xb}) \equiv V_{xb}^{\text{eff}}(\mathbf{r}_{xb})\varphi_{N'L'}(\mathbf{r}_{xb}) \quad (30c)$$

függvényre egy δ -függvényre emlékeztető alakot kapunk. D_0^2 értéke (d, p) reakció esetén [13]

$$D_0^2(d, p) = 1,53 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \text{ fm}^3 \quad (30d)$$

míg (${}^6\text{Li}, d$) esetén, [56, 63]

$$D_0^2({}^6\text{Li}, d) = 0,37 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \text{ fm}^3 / S_\alpha({}^6\text{Li}) \quad (30e)$$

ahol $S_\alpha({}^6\text{Li})$ a ${}^6\text{Li}$ mag α -spektroszkópiái faktora.

A ZR közelítés fizikai jelentéséről szintén lesz szó később, a 4.1. fejezetben, így ezzel a kérdéssel most nem foglalkozunk tovább.

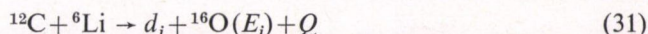
Eredeti célkitűzésünknek megfelelően inkább az iránt érdeklődünk, hogy mikor lehet α -transzfer esetén a fenomenologikus elméletet, (26)-ot alkalmazni. A FDWBA-t főként az egynukleont átadó transzfer reakciók esetére fejlesztették ki és alkalmazták sikerrel. Egyetlen nukleon esetén kimutatható, hogy a transzfer a core-ok nagy

távolsága esetén játszódik le [28]. Így a (25) alatti MDWBA kifejezés helyett nagy valószínűséggel a (26) alatti FDWBA alkalmazható. α -transzfer esetén viszont négy nukleon átadásáról van szó, amely disszociálhat az öt befogadó target magban, s ezért csak igen speciális (az említett két) esetben várható, hogy a FDWBA alkalmazható. Vizsgálódásunk tárgya éppen annak megállapítása, hogy mikor kell a mikroszkopikus DWBA elméletet alkalmazni az α -transzfer reakciók által szolgáltatott új típusú információk kinyerésére.

A következő alfejezetben ezért első lépésként a (26) alatti FDWBA-t használva meghatározzuk néhány $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*$ átmenet differenciális hatáskeresztmetszetét.

2.3. Eredmények a fenomenologikus DWBA elmélet keretén belül a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}^*[E_i]$ α -transzfer átmenetekre

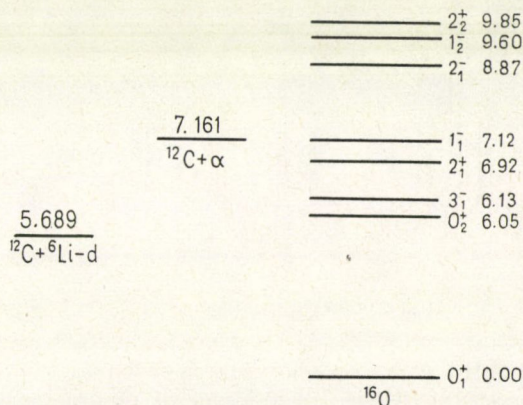
Tekintsük a



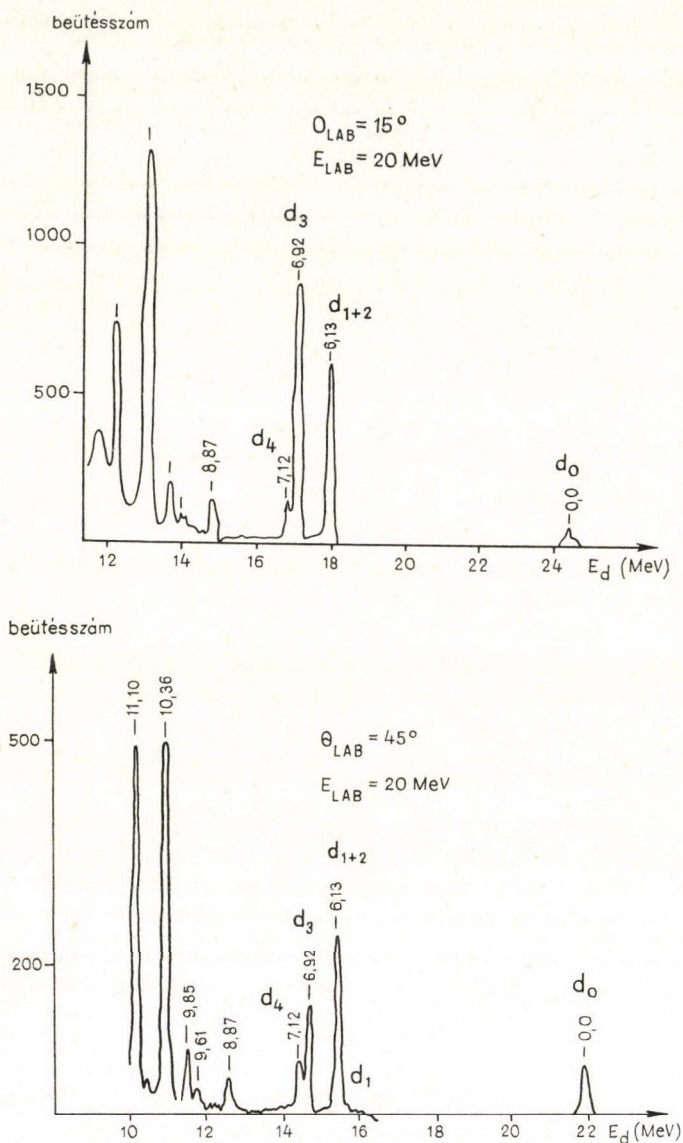
reakciót oly módon, hogy ^6Li ionokat lövünk $E_{^6\text{Li}} = 20$ MeV laboratóriumi energiával a nyugvó ^{12}C magokra és a kirepülő d_i deuteronokat detektáljuk a teljes szögterományban. Az i index a keletkezett ^{16}O mag energiaállapotait számozza. Ennek megfelelően adott $E_{^6\text{Li}}$ bombázó energián különböző energiájú deuteronokat detektálunk, s ezt jelzi a d -on levő i index. Az alapállapotra vezető (31) reakció Q értéke pozitív [4]:

$$Q = M_{^{12}\text{C}_{gs}} + M_{^6\text{Li}_{gs}} - (M_{^{16}\text{O}_{gs}} + M_d) = 5,689 \frac{\text{MeV}}{c^2} \quad (32)$$

azaz a reakció exoterm, tehát elvileg zérus bombázó energián is végbemenne (Coulomb-gát hiányában) és a keletkező d_0 részecske megközelítőleg Q kinetikus energiával repülne ki, míg a többi energia az $^{16}\text{O}_{gs}$ visszalökődésére fordítódna. Jól szemlélteti az energiaviszonyokat a 4. ábrán látható nívóséma [4], ahol az ^{16}O -re vonatkozó α -bomlási küszöbenergiát is feltüntettük.



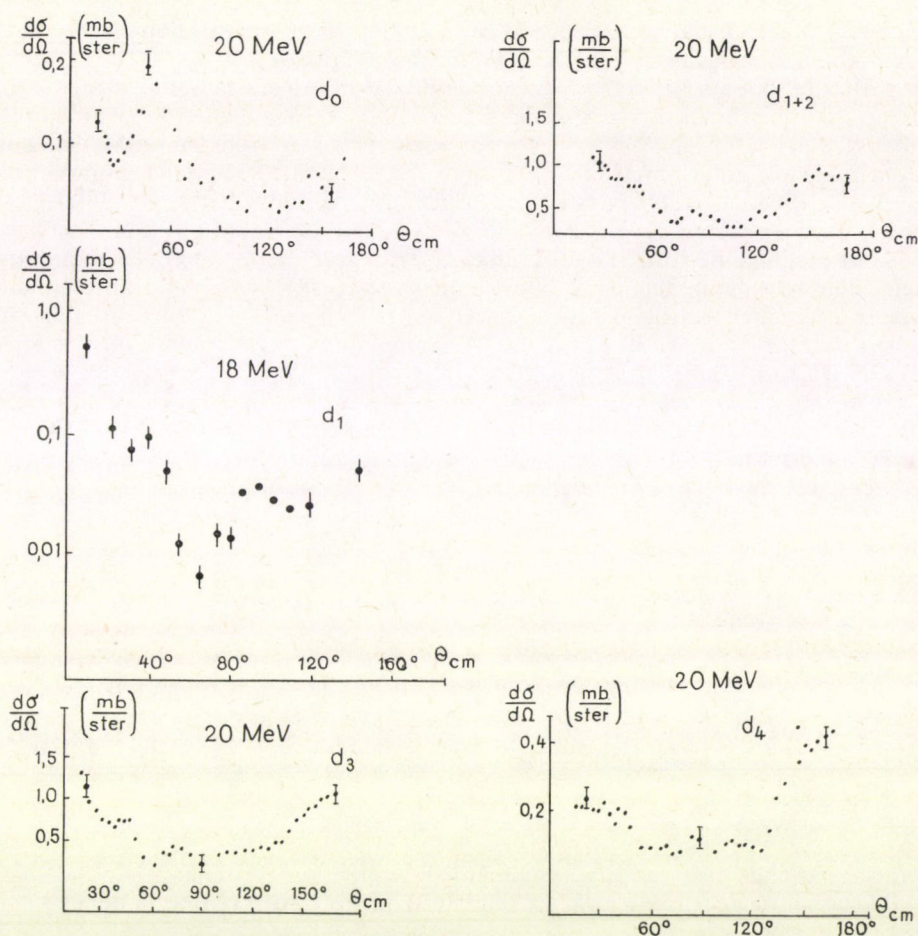
4. ábra. Az ^{16}O energianívói (MeV-ban) 9,85 MeV-ig. Feltüntettük a 7,161 MeV α -bomlási küszöb-értéket, valamint a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}$ reakció Q értékét (5,689 MeV) is



5. ábra. A $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}$ reakció spektruma $\theta_{\text{LAB}} = 15^\circ$ és 45° szögértéken

Az 5. ábrán a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d)^{16}\text{O}$ reakció spektruma látható $\theta_{\text{LAB}} = 15^\circ$ és 45° szórási szögértéken mérve [18]. A kiemelkedő csúcsok rendre megfelelnek az oxigén mag energia szintjeinek.

A mechanizmus kérdésének tisztázásához felhasználhatók a 2. ábrán látható gerjesztési függvények. Ezenkívül becslést lehet találni [20] arra nézve, hogy az eset-

6. ábra. A $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d_i)$ reakciók differenciális hatáskeresztmetszete

leges közbenső mag képződésből eredő járulék nem múlja felül a teljes hatáskeresztmetszet 50%-át az általunk vizsgált reakciókban. Ez reményt nyújt a direkt mechanizmusból eredő karakterisztikus, oszcilláló jellegű differenciális hatáskeresztmetszet mérésben való kimutathatóságára s ezáltal a számolásokban való reprodukálhatóságára. A kompaund reakcióból eredő differenciális hatáskeresztmetszet ui. egy 90° körüli szimmetrikus *sima* eloszlás görbe. Ha erre egy hasonló nagyságrendű oszcilláló eloszlás görbe szuperponálódik, akkor ez az oszcilláció a mérésekben kimutatható, jól észrevehető. A számolásban is reprodukálhatók ekkor ezek az oszcillációk, legfeljebb azt tapasztaljuk, hogy a hatáskeresztmetszet *nagyságát* egy kettes faktor erejéig tudtuk csak visszaadni elméletileg.

A közbenső magképződés vagy közvetlen reakció kérdésének további tisztázásához a szögeloszlások alakjának vizsgálata nyújt segítséget. Mivel a $^{12}\text{C} + ^6\text{Li}$ rendszer $E_{^6\text{Li}} = 20$ MeV bombázó energia esetén kb. háromszoros Coulomb-energián

van, nem meglepő, ha közvetlen reakcióra utaló szögeloszlást találunk a vizsgált reakciókban. A szögeloszlások [18, 76] a 6. ábrán láthatók. A d_0 és d_1 szögeloszlást várható módon a közvetlen reakció alakítja ki döntő részben, míg a d_{2+1} szögeloszlás inkább a közbenső mag kialakulására utal. A d_3 -as deuteron hozamban látható oszcillációk, ill. a d_4 -es szögeloszlás aszimmetrikus volta azt indikálja, hogy ezek a reakciók is tartalmaznak észrevehető (detektálható) közvetlen komponenset,

A közbenső-mag képződéssel járó reakcióról mondottakat szem előtt tartva, elvégezzük a 6. ábrán levő szögeloszlásokra vonatkozó elméleti számolásokat a (26) alatt megfogalmazott FDWBA elmélet segítségével. A bevezetőben mondottak értelmében fel fogjuk tételezni, hogy a négy részecske egyszerre transzferálódik olyan szerkezettel, amellyel egy α -részecske rendelkezik. Továbbá alkalmazzuk a zérus hatótávolságú (ZR) közelítést. A számolást az irodalomban igen elterjedt [21] DWUCK-kóddal [13] végezzük el.

A bejövő és kimenő csatornában a $\Phi^{(+/-)}(\mathbf{K}, \mathbf{r})$ torzított hullámokat a rugalmas szórás-analízisekből ismert optikai potenciálokkal generáljuk. A $^{12}\text{C}-^6\text{Li}$ szórásanalízist Meier—Ewert és társai végezték el [22] 20 MeV bombázó energián, eredményüket az 1. táblázat tartalmazza. A $^{16}\text{O}-d$ csatornabeli analízis Newman

1. TÁBLÁZAT

A felhasznált optikai potenciál adatok

Csatornák	V_0 (MeV)	r_0 (fm)	a	W_D (MeV)	r_{01} (fm)	a_1	r_{0c} fm	Irodalom
$^{12}\text{C}-^6\text{Li}$	35,0	1,42	1,04	8,46	2,17	0,49	2,5	[22]
$^{16}\text{O}-d$	92,94	1,036	0,787	6,00*	1,355	0,727	1,3	[23]

* Az eredetihez képest 30%-kal csökkentett érték.

és társai nevéhez fűződik [23], eredményük szintén az 1. táblázatban található. A táblázatban levő paramétereket a felületi Woods—Saxon optikai potenciál

$$U(r) = -\frac{V_0}{1+e^x} + i4W_D \frac{e^{x'}}{(1+e^{x'})^2} + U_{r_{0c}}(r) \quad (33)$$

képletébe kell behelyettesíteni, ahol

$$U_{r_{0c}}(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2R_c} \left(3 - \frac{r^2}{R_c^2} \right) & \text{ha } r \leq R_c \equiv r_{0c} A^{1/3} \\ \frac{Ze^2}{r} & \text{ha } r > R_c \end{cases} \quad (34)$$

a Coulomb-potenciál, A a targetmag tömegszáma,

$$x = \frac{r-r_0 A^{1/3}}{a}, \quad x' = \frac{r-r_{01} A^{1/3}}{a_1}.$$

A (${}^6\text{Li}, d$) α -transzfer reakciók fenomenologikus analizisében standardnak számít [79] és a ZR közelítésben alapuló DWUCK-kód az optikai potenciál adatokon kívül csupán az $F(r_\alpha, {}^{12}\text{C})$ α -részecske ${}^{16}\text{O}$ -beli alakfaktorát igényli (1. (17) egyenlet). A fenomenologikus elmélet ezt $F = S^{1/2} ({}^{16}\text{O}) \varphi_{NL}$ formában közelíti, ahol $S^{1/2}$ az oxigén mag α -spektroszkópai faktorából vont, pozitív előjellel vett négyzetgyök, φ_{NL} -et pedig a $\{{}^{12}\text{C} + \alpha\}_{NL}^{\text{bound}}$ kötött rendszert létesítő nukleáris + Coulomb-potenciál egységre normált sajátfüggvényként kapjuk. Ezt a potenciált egy valós WS alakban vesszük fel s a paraméterek közül a V_0 völgymélységet úgy választjuk meg, hogy az α -részecske ${}^{16}\text{O}$ -beli $E_{\alpha i}^{\text{bound}}$ kötési energiája reprodukálódjon, azaz a

$$[T + \text{Re } U(r_\alpha, {}^{12}\text{C})] \varphi_{NL} = E_{\alpha i}^{\text{bound}} \varphi_{NL} \quad (35)$$

Schrödinger-egyenlet teljesüljön. (Ez az ún. „völgymélység eljárás”.) Mivel az alakfaktor szoros kapcsolatban áll a magszerkezettel és ennek szögeloszlást módosító hatása képezi vizsgálatunk tárgyát, az alakfaktort két szélsőséges szemléletmódból határozzuk meg. A WS potenciál diffúziását $a = 0,65$ fm értéken rögzítjük, a sugárparaméternek viszont két értékét, $r_0 = 1,3$ fm (a továbbiakban WSI eset) és $r_0 = 2,03$ fm ($WSII$ eset) engedjük meg a számolás során. A kisebb érték a szerkezet-számolásból adódó magsugár paraméter, míg az utóbbit éppen a magreakció számolásokban használják előszeretettel. Ez a nagy érték egyébként azt jelenti, hogy nemcsak a targetmag, de a befogódó α -mag sugarát is figyelembe kell venni az alakfaktor fenomenologikus meghatározásánál, ugyanis $2,03 \times 12^{1/3} = 1,2 (12^{1/3} + 4^{1/3})$. Az irodalomban éppen jelenleg folyik vita ennek a nagy értéknek az eredetéről. Egyesek [56] azt állítják, hogy a könnyű magok speciális α -clusterizációs sajátossága fejeződik ki benne, mások [57] az antiszimmetrizációval hozzák összefüggésbe.

Az α -részecske kötött állapoti relatív hullámfüggvényének kvantumszámait a naiv (egyrészecske) héjmodell alapján a következő feltételezésekkel állapítjuk meg: A ${}^{12}\text{C}$ alapállapoti konfigurációja $(0s)^4(0p)^8$ és ez az állapot a transzfer során nem változik meg. Az oxigén mag $[O_i^+, 0.0]$ alapállapota ebből úgy áll elő, hogy négy nukleont helyezünk az $0p$ héjra, míg a gerjesztett állapotokat úgy kapjuk, ha ebből a legkülső négy nukleonból egyet, vagy hármat (páratlan paritás esete), illetve kettőt vagy négyet (páros paritás esetén) az $1s$ vagy $0d$ héjra teszünk. Ennek megfelelően az ${}^{16}\text{O}$ -ben kötött α -részecske relatív NL kvantumszámait a

$$\sum_{i=1}^4 (2v_i + l_i) = 2N + L, \quad (36)$$

$$A(L, J(\alpha), J({}^{16}\text{O})), \quad (37)$$

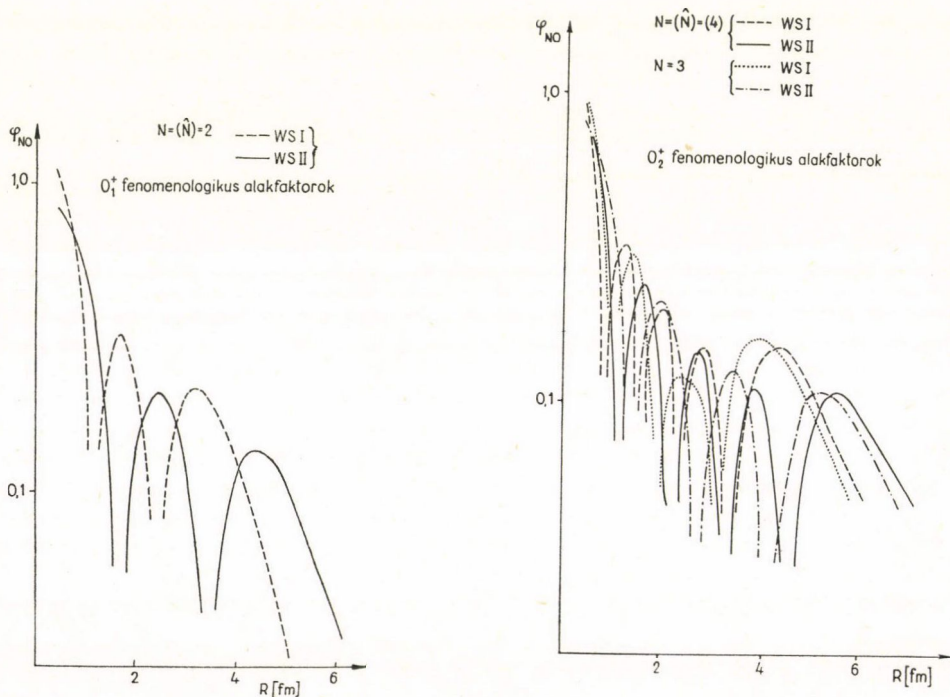
$$(-1)^{l_1+l_2+l_3+l_4} = (-1)^L \quad (38)$$

egyenletekből kapjuk, ahol (v_i, l_i) az i -edik részecske pályáját jellemző kvantumszám, a (36)-os egyenlet az energiamegmaradást, a (37) egyenlet az impulzusmomentum vektoriális összegeződésének teljesülését, a (38)-as egyenlet pedig a paritás megmaradását biztosítja. A 2/a táblázat foglalja össze a (36)–(38) alkalmazásával kapott NL kvantumszámokat a különböző ${}^{16}\text{O}(J_i^\pi, T=0)$ állapotokra. A táblázatban feltüntetettük a részecskék feltételezett elhelyezkedését is a különböző héjakon, zárójelbe téve a naiv héjmodell által kevésbé valószínűnek jósolt elhelyezkedést s az ebből számolt kvantumszámokat.

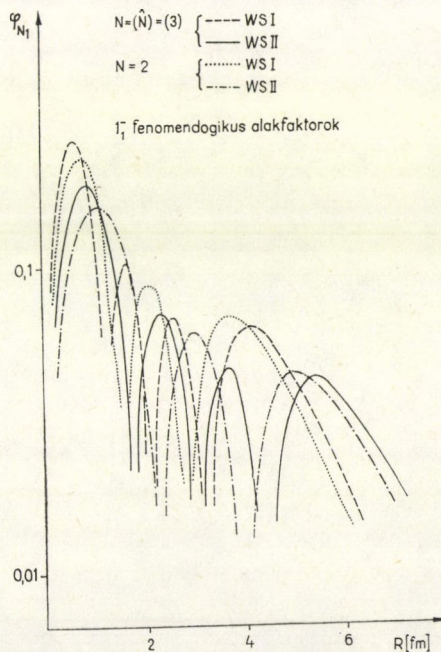
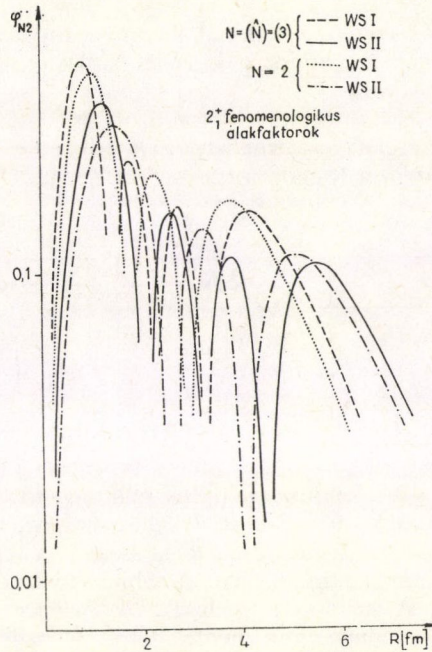
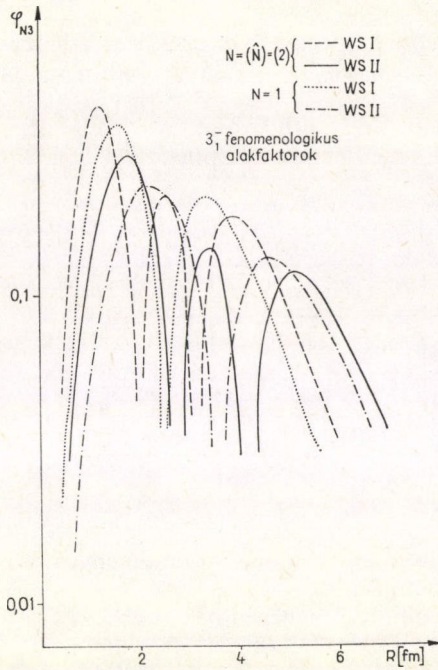
2/a TÁBLÁZAT

Részecskék elhelyezkedése						
J_i	0p	1s v. 0d	L	$\sum_{i=1}^4 (2v_i + l_i)$	N	\tilde{N}
0_1^+	4	—	0	4	2	2
0_2^+	2 (—)	2 (4)	0	6 (8)	3 (4)	4
3_1^-	3 (1)	1 (3)	3	5 (7)	1 (2)	2
2_1^+	2 (—)	2 (4)	2	6 (8)	2 (3)	3
1_1^-	3 (1)	1 (3)	1	5 (7)	2 (3)	3

A táblázatban feltüntettük továbbá a mikroszkopikus alakfaktorok által adott \tilde{N} csomópontszám értékeket is (l. 4. fejezet). Láthatjuk, hogy a 0_1^+ állapot kivételével a mikroszkopikus számolás az összes esetre a naiv héjmodell által kevésbé valószínű kvantumszámokat jósolja. (Tekintettel arra, hogy az alakfaktorok csomópontszáma a magszerkezettel áll egyértelmű összefüggésben [38], az \tilde{N} kvantumszámok esetére elvégzett fenomenologikus számolást előnyben részesíthetnénk az



7. ábra



7/a—e. ábrák. $\varphi_{NL}(R)$ fenomenologikus (normált) α -transzfer alakfaktorok a szövegben leírt kétfajta WSI és WSII közelítésben és kétféle nódusszámmal

N értékekre adódónál. Azonban fogjuk majd látni, hogy egyik választás sem ad megfelelően számot a kísérleti hatáskeresztmetszetnek sem az alakjáról, sem a nagyságáról.)

A transzferrel létrehozott $^{16}\text{O}^*$ állapotok energiáját, a hozzájuk tartozó α -kötési energiát, az átmenetek Q értékét és a mért teljes hatáskeresztmetszeteket a 2/b táblázat foglalja össze.

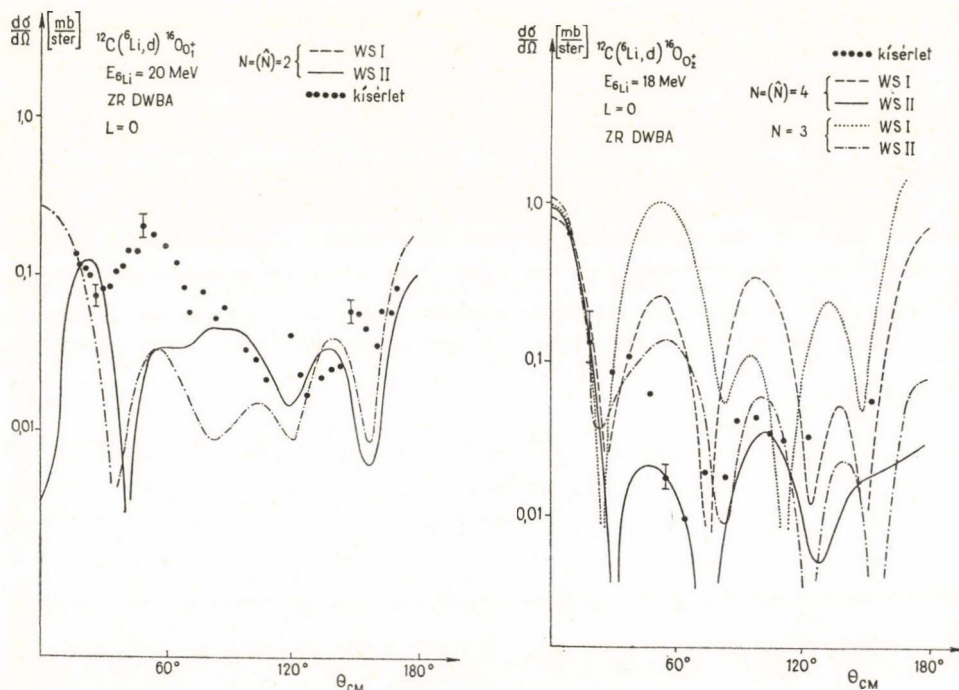
2/b TÁBLÁZAT

J_i	$E_J(^{16}\text{O})(\text{MeV})$	$E_{\alpha i}(\text{MeV})$	$Q(\text{MeV})$	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{exp}}(\text{mb})$
0_1^+	0,0	-7,16	+5,689	0,85
0_2^+	6,05	-1,11	-0,361	—
3_1^-	6,13	-1,03	-0,442	6,4
2_1^+	6,92	-0,242	-1,23	6,0
1_1^-	7,12	-0,0423	-1,43	1,8

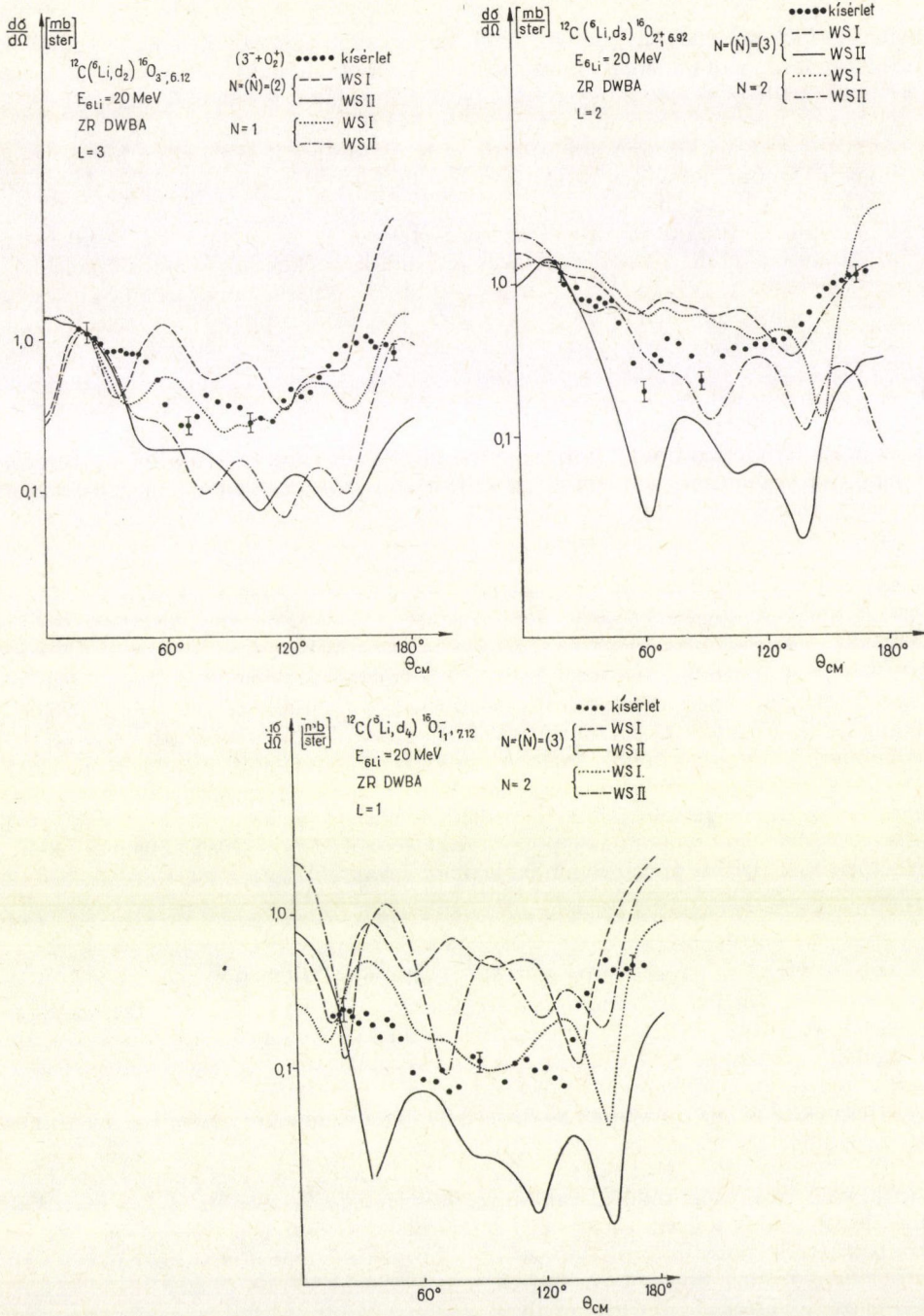
A fenomenologikus számoláshoz szükséges $\varphi_{NL} = F/S^{1/2}(^{16}\text{O})$ (normált) alakfaktorokat a 7/a—e ábrákon láthatjuk.

A 8/a—e ábrák tartalmazzák a fenomenologikus számolás végeredményeit. Az ábrákat tanulmányozva több megállapítást tehetünk:

1. A számolt szögeloszlások bármelyikét is tekintve, nehezen lehetne a kísérleti eredménynek megfeleltetni. Némely esetben, pl. a O_2^+ oxigén állapotnak meg-



8. ábra



8/a—e. ábrák. $d\sigma_{(NL)}(\theta)/d\Omega$ fenomenológikus differenciális hatáskeresztmetszet számolás eredményei ZR DWBA közelítésben a 7/a—e ábrán látható alakfaktorok alkalmazása esetén

felelő d_1 -es szögeloszlás esetén, némi hasonlóság mutatkozik a maximumok és minimumok váltakozásában, azonban a kísérleti adatok éppen erre az esetre nagyon hiányosak, úgy hogy ez az egyezés látszólagos is lehet. A nagyfokú alaki eltérés miatt a nagyságrendi vizsgálatok nem sok jelentőséggel bírnak. A 4.4. fejezetben, a mikroszkopikus számolások normálása kapcsán, azonban látni fogjuk, hogy a fenomenologikus számolások a hatáskeresztmetszetek nagyságát sem adják vissza helyesen.

2. Úgy tűnik, mintha a d_0 szögeloszlás kivételével az $N=(\tilde{N})$ WSI, WSII esetre az összes reakcióra a kísérleti értékek a számolt értékek között húzódnának. Ez azt jelentené, hogy $r_0=1,3$ fm és $r_0=2,03$ fm között levő sugárparaméter értéket kellene választani a fenomenologikus leírás céljára. Azonban ezt a megfontolást a próbaszámolások nem támasztották alá, közbülső sugárparaméter értékekkel sem kaptunk jobb egyezést egyik esetre sem (O_1^+ esetén l. [55]).
3. A naiv héjmodell bizonytalansága sem oldható fel oly módon, hogy valamelyik N vagy (\tilde{N}) érték mellett döntenének a kapott eredmények. Úgy tűnik, mintha az a kérdésfeltevés hogy egyik, vagy másik NL -lel kapunk helyes magyarázatot, helytelen volna. Ehelyett mintha azt kellene kérdezni: vajon nem kellene-e *mindkét* konfigurációt (s az ennek megfelelő N és (\tilde{N}) kvantumszámokat) figyelembe venni?

2.4. A mikroszkopikus módszer kiválasztása

Az előző fejezetben felsorolt 2. és 3. hiányosságokon úgy próbálunk segíteni, hogy a (26a) fenomenologikus DWBA átmeneti amplitúdó helyett jobb közelítést alkalmazunk. Mivel az eddigi tapasztalat azt mutatta, hogy a különböző NL tömegközépponti kvantumszámhoz tartozó alakfaktorral számolt differenciális szögeloszlások nagyon különbözőek és jelentősen eltérnek egymástól alakra és nagyságra, célszerű megtartani a (25) egyenletben látható összegezésből a végmagbéli α -részecske tömegközépponti állapotaira vonatkozót. Azaz, (26a) helyett a feltételezhetően jobb leírást adó, de mindenképpen egzaktabb kifejezést

$$T(\theta) = A_{N'L'} \sum_{NL} A_{NL} B_{NL}(\theta) \quad (39)$$

használjuk. Ezzel egy lépéssel túlmegyünk a legdurvább (FDWBA) leírásn. Továbbá mikroszkopikus héjmodellt fogunk használni az A_{NL} számolására. Ezzel az előző fejezet 3. pontban említett bizonytalanság azonnal megszűnik, ugyanis egy reális héjmodell egyértelműen megadja a nukleonok egyrészecske héjakon való elhelyezkedéseinek (a nukleonkonfigurációk) valószínűségét, amiből viszont egyértelműen következnek (36)–(38) révén az α -cluster (NL) kvantumszámait, amelyekre (39)-ben összegeznünk kell.

(39)-ben minden (NL) relatív állapot járuléka egy előjeles mennyiséggel, az α -spektroszkópiai amplitúdóval van súlyozva s így végső soron az A_{NL} -ek mondják meg nekünk, hogy milyen jelentős egy NL járuléka az összegben. A 8/a—e ábrákon azonban látjuk, hogy $\sigma_{(NL)}(\theta) \sim |B_{NL}(\theta)|^2$ több nagyságrendet is változhat, így várható már előre az, hogy olyan A_{NL} -ek is beleszólnak a (39) összeg kialakításába (bizonyos θ értékek esetén), amelyek a legnagyobb A_{NL} -től abszolút értékben 1/3-os, 1/4-es vagy akár 1/10-es faktorban különböznek. Így az előző fejezet 1. pont-

jában említett alakí viselkedés javulására (de legalább is változására) megvan minden reményünk.

Megszabadulunk az előző fejezet 2. pontjában említett bizonytalanságtól is, mert az alakfaktor kiterjedtségét a használt mikroszkopikus modell rögzíti le.

A (18a) definícióból látszik, hogy az alakfaktort olyan hullámfüggvényekből kell összerakni, amilyen hullámfüggvénnyel a spektroszkópiai amplitúdókat számoltuk. A héjszerkezet számolások megmutatták [24], hogy az oszcillátor hullámfüggvények megfelelőek a magok belső tulajdonságainak (összenergiák, sűrűségelosztás, magsugár, elektromágneses átmenetek) jellemzésére. Az oszcillátor hullámfüggvények viszont az ismert rossz aszimptotikus viselkedés miatt nem alkalmasak reakciószámolásokra. Az egynukleon transzfer reakciók tanulmányozása ugyanis arra a felismerésre vezetett, hogy a reakciók a magok felületétől nagy távolságban játszódnak le [28] s így módon az alakfaktor aszimptotikus részének döntő szerepe van a reakció leírásában. Előfordulhat viszont, hogy α -transzfer esetén az alakfaktor magbéli része is fontossá válik, mert nem kizárt, hogy az átmeneti amplitúdóbéli radiális integrálok a mag belsejéből is tartalmaznak járulékot [60]. [28] megfontolása szerint a külső tartományban (a targetmag felületén kívül) a fizikai aszimptotikával rendelkező WS hullámfüggvényeket kellene használnunk. Mivel a WS hullámfüggvényeket csak numerikus formában tudjuk megadni, a spektroszkópiai amplitúdók kiszámítása WS hullámfüggvényekkel nagyon időigényes lenne. Másrészt, valószínűleg hasonló eredményekre vezetne, mint amiket a HO hullámfüggvények használatával kapnánk, ugyanis a spektroszkópiai amplitúdók a mag belsejéről tartalmaznak információt, mivel a magok belső hullámfüggvényeinek átfedéseként definiáltuk őket (l. (17b) egyenlet) s mint azt megjegyeztük, a tapasztalat az, hogy a mag belsejét a HO modell jól leírja. A következő fejezetben ezért az A_{NL} spektroszkópiai amplitúdókat HO hullámfüggvények használatával fogjuk kiszámítani egy sikeres, realiztikus héjmodell keretén belül. Ezzel az alakfaktorunk magon belüli részét lerögzítettük: az HO hullámfüggvények spektroszkópiai amplitúdókkal szorzott lineárkombinációja lesz. A magon kívüli aszimptotikus tartományban pedig egy, a belső rész utolsó maximumához simán illeszkedő, helyes aszimptotikájú WS -függvényt illesztünk. Ezt a WS aszimptotikát egy olyan megoldásból vesszük, amely ugyanannyi nódusszámmal rendelkezik, mint az alakfaktor [69]. Azt mondjuk, hogy $HO+WS$ alakfaktort használunk és a helyes aszimptotika előállítás módja miatt ezt a korrigált alakfaktort SE (szeparációs energia) betűkkel fogjuk majd jelölni az ábrákon. Minderre majd csak a 4. fejezetben kerül sor, ahol megvizsgáljuk a csupán HO hullámfüggvényekből összeállított alakfaktornak és az előbb említett módosított (SE) alakfaktornak a differenciális hatáskeresztmetszetre gyakorolt hatását is.

A következő fejezetben a (39)-beli koherencia hatás kialakításában döntő szerephez jutó magszerkezeti mennyiséget, az A_{NL} spektroszkópiai amplitúdókat fogjuk meghatározni az ^{16}O 20 MeV alatt fekvő energiaállapotaira.

3. Az α -spektroszkópiai amplitúdó (ASA) származtatása

3.1. Az ASA definíciója Zuker, Buck és McGrory-féle héjmodell hullámfüggvény használata esetén

Az előző fejezetben mondottak értelmében a transzfer számolások mikroszkopikus kivitelezéséhez szükségünk van a spektroszkópiai amplitúdók ismeretére. α -transzfer esetén speciálisan az α -spektroszkópiai amplitúdókat (ASA) kell meghatározni. A spektroszkópiai amplitúdókat definiáló (18b) egyenletet ASA-ra specifikálva kapjuk az ASA definícióját

$$A_{NL}(B, A) = \left(\frac{B}{4}\right)^{\frac{1}{2}} \int d\xi_\alpha d\zeta_\alpha d\mathbf{r}_{\alpha A} \chi_A^{0000*}(\xi_\alpha) \chi_\alpha^{0000*}(\zeta_\alpha) \varphi_{NLM}(\mathbf{r}_{\alpha A}) \chi_B^{LM00}(\zeta_B). \quad (40)$$

Ebben a definícióban χ^{JMTM} belső hullámfüggvényeket jelöl, azaz olyan maghullámfüggvényeket, amelyek nem függenek a mag tömegközéppontjának koordinátájától. A gyakorlatban azonban a magok leírására héjmodell hullámfüggvények állnak rendelkezésre, amelyek tartalmazzák (implicite) a mag középpontjának a koordinátáját is. [29] megmutatta, hogy héjmodell hullámfüggvényeket használva (40) a következő alakba írható (vö. [30]):

$$A_{NL}(B, A) = -\left(\frac{B}{4}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{B}{A}\right)^{N+\frac{1}{2}L} \sum_{\beta} \langle \Psi_A \Psi_{\beta} | \rangle \Psi_{\beta}(\zeta_\alpha) d\zeta_\alpha, \quad (41)$$

ahol $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}; v_0)$ a később részletesen definiálandó $v_0 = \frac{m_0 \omega}{\hbar}$ paraméterű oszcillátorfüggvény, amely az α -részecske tömegközéppontjának az A maghoz viszonyított mozgását írja le. $\{\Psi_{\beta}\}$ egy teljes négy nukleon függvényrendszer, ζ_α jelenti a négyrészecske héjmodell koordinátákat, $\langle | \rangle$ pedig a négyrészecske részleges származási együttható (cfp) jelölésére szolgál. A $(B/A)^{N+L/2}$ faktor veszi figyelembe azt a tényt, hogy az A targetmag tömegközéppontja nem esik egybe a B keletkezett mag tömegközéppontjával. Ez a tényező az A és B tömegközéppontjainak különbözőségét csak első rendben és oly módon veszi figyelembe, hogy a tömegközéppontok mozgását oszcillátor hullámfüggvénnyel írja le (ez az oka annak, hogy (41)-ben is oszcillátor hullámfüggvény jelent meg az α -részecske tömegközépponti mozgására). Bár a tömegközéppontok különbözőségének figyelembevétele csak közelítő, nagy valószínűséggel feltehetjük [31], hogy a döntő járulék ebből az első közelítésből adódik.

Ha olyan héjmodellt használunk a B mag leírására, ami az A magra, mint inert törzsre épül, akkor az ASA a

$$A_{NL}^{SM}(B, A) = -\left(\frac{B}{A}\right)^{N+\frac{1}{2}} \sum_{\beta} c_{\beta}^{SM} \int d\zeta_\alpha \chi_{\alpha}^{*}(\xi_\alpha) \varphi_{NLM}^{*}(\mathbf{q}_4; v_0) \Psi_{\beta}(\zeta_\alpha) \quad (42)$$

formában írható [30], ahol c_{β}^{SM} a héjmodell által szolgáltatott konfigurációs együtt-hatók, Ψ_{β} pedig egy adott négyrészcse konfigurációt jelöl.

Feladatunk az, hogy az ^{16}O állapotokra számoljuk ki az ASA-kat. Ennek érdekében a legmegfelelőbbnek látszik a Zuker, Buck és McGrory (ZBM) által 1968-ban közölt [32] és azóta számos próbát sikerrel kiálló [33] héjmodell hullámfüggvényt használni a ^{16}O állapotainak leírására. Ez a héjmodell valójában egy egzakt, teljesen antiszimmetrizált négyrészcse héjmodell számolás, mivel a ^{12}C mag a $0p_{3/2}$ $1s_{1/2}$ és $0d_{5/2}$ egyrészcse héjakat kialakító inert törzsként van tárgyalva, míg az általa kialakított három héjon négy nukleon mozoghat. Az oxigén mag teljes hullámfüggvénye így

$$\Psi_{^{16}\text{O}}^{J^{\pi T}} = \Psi_{^{12}\text{C}} \sum_{\beta} c_{\beta}^{\text{ZBM}} \Psi_{\beta}^{J^{\pi T}}(\zeta_{\alpha}), \quad (43)$$

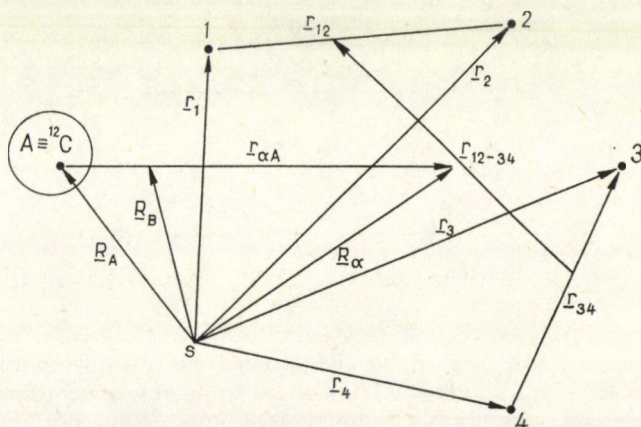
míg az effektív kétrészcse kölcsönhatáson [34] keresztül egymásra ható és a különböző egyrészcse héjakon elhelyezkedő (az inert törzssel való egyrészcse kölcsönhatásban levő) négy nukleon különböző $E(J_i^{\pi T})$ energiaállapotot hoz létre, ami a héjmodell számolások ismert eljárása szerint [35] diagonalizációval kapható meg. A héjmodell számolás eredménye az egyes $E(J_i^{\pi T})$ teljes energia értékek és a hozzá tartozó $\{c_{\beta}(J_i^{\pi T})\}$ héjmodell együtt-ható sorozat, amely a különböző β négyrészcse konfigurációk $|c_{\beta}|^2$ valószínűségét adja meg úgy, hogy $\sum_{\beta} |c_{\beta}|^2 = 1$.

ZBM héjmodellt használva a $B \equiv ^{16}\text{O}$ mag leírására, a (41) alatti ASA ^{16}O -re vonatkozó alakja a következő lesz:

$$A_{NL}^{\text{ZBM}}(^{16}\text{O}[J^{\pi}, T], ^{12}\text{C}_{gs}) = - \left(\frac{16}{12} \right)^{N + \frac{L}{2}} \sum_{\beta} c_{\beta}^{\text{ZBM}} \times \\ \times \int \chi_{\alpha}^*(\zeta_{\alpha}) \varphi_{NLM}^*(Q_4; v_0) \Psi_{\beta}^{J^{\pi T}}(\zeta_{\alpha}) d\zeta_{\alpha}. \quad (44)$$

A továbbiakban ezt az integrált fogjuk olyan alakra hozni, amely már számítógépre programozható. Ennek érdekében először is az integráljel alatt álló szimbólumok jelentését vesszük sorra jobbról balra haladó sorrendben;

a) a koordináták jelentésének tisztázása érdekében tekintsük a 9. ábrát, ahon-



9. ábra. A (45)-ös egyenletben szereplő koordináták összefüggései. S a héjmodell centrumát jelöli

nan leolvashatók a következő összefüggések:

$$\varrho_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{r}_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (45a)$$

$$\varrho_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{r}_{34} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4), \quad (45b)$$

$$\varrho_3 = \mathbf{r}_{12-34} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4), \quad (45c)$$

$$\varrho_4 = 2\mathbf{R}_\alpha = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4). \quad (45d)$$

A (45) alatt álló egyenlet-sorozat kapcsolatot teremt két koordináta-rendszer, a belső:

$$\zeta_\alpha \equiv (\varrho_1 \varrho_2 \varrho_3; \{\sigma_i \tau_i\}, i = 1, \dots, 4) \quad (46a)$$

és a külső (individuális):

$$\zeta_\alpha \equiv (\{\mathbf{r}_i; \sigma_i \tau_i\}, i = 1, \dots, 4) \quad (46b)$$

koordináta-rendszer között. Itt σ_i, τ_i és \mathbf{r}_i az i -edik nukleon spin, izospin és térkoordinátáját jelöli.

(45)-ből levezethetők az infinitezimális térfogatelemek közti következő összefüggések [30]:

$$\begin{aligned} d\zeta_\alpha &\equiv \prod_{i=1}^4 d\mathbf{r}_i d\sigma_i d\tau_i = -d\mathbf{r}_{12} d\mathbf{r}_{34} d\mathbf{r}_{12-34} d\mathbf{R}_\alpha \prod_{i=1}^4 d\sigma_i d\tau_i = \\ &= -8 d\varrho_1 d\varrho_2 d\varrho_3 d\mathbf{R}_\alpha \prod_{i=1}^4 d\sigma_i d\tau_i = - \prod_{i=1}^4 d\varrho_i d\sigma_i d\tau_i \equiv -d\zeta_\alpha d\varrho_4 \end{aligned} \quad (46c)$$

b) a ZBM négyrészesecske állapotok szerkezetét [36], magyarul [37] tárgyalja. Ezért itt csak azt említjük meg, hogy a Ψ_β^{JT} antiszimmetrizált négyrészesecske állapot a következő csatolási séma szerint van felépítve:

$$\begin{aligned} \Psi_\beta^{JT} &\equiv \begin{array}{c} \text{Diagram: A parallelogram with vertices labeled } J_1 T_1 s_1 \tau_1 x_1 \text{ (top-left), } J_2 T_2 s_2 \tau_2 x_2 \text{ (top-right), } J_3 T_3 s_3 \tau_3 x_3 \text{ (bottom-right), and } J_4 T_4 s_4 \tau_4 x_4 \text{ (bottom-left). A diagonal line connects } J_1 T_1 s_1 \tau_1 x_1 \text{ and } J_3 T_3 s_3 \tau_3 x_3. The interior of the parallelogram is labeled } JT. \end{array} \\ &= [(d_{5/2})^{n_1} (J_1 T_1 s_1 \tau_1 x_1) (s_{1/2})^{n_2} (J_2 T_2 s_2 \tau_2 x_2)]^{n_1+n_2} (J_{12} T_{12} s_{12} \tau_{12} x_{12}) (p_{1/2})^{n_3} \times \\ &\quad (J_3 T_3 s_3 \tau_3 x_3)^4 (JT), \end{aligned} \quad (47)$$

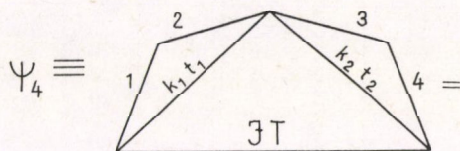
ahol (n_1, n_2, n_3) az adott d, s , ill. p héjon elhelyezkedő nukleonok száma, $J_i T_i$, az i -edik héjon levő n_i számú nukleon eredő impulzuszmomentuma és izospinje, s_i, τ_i, x_i pedig eredő szenioritása, redukált izospinje, és egy pótlólagos kvantumszáma, ha a $J_i T_i s_i$ és τ_i nem jellemzi egyértelműen az i -edik héjon levő nukleonok állapotát. A d és s héjakon levő $n_1 + n_2$ számú nukleon $J_{12} T_{12} s_{12} \tau_{12} x_{12}$ állapotát

van összecsatolva, és ehhez csatoljuk a p héjon levő n_3 számú nukleon-állapotot, hogy az eredő JT kiadódjon.

Minden Ψ_{β}^{JT} ZBM (antiszimmetrizált) konfiguráció kifejtése szimbolikusan felírható [38] a

$$\Psi_{\beta} = h_{\beta}(\delta; k_1 t_1, k_2 t_2, JT) \Psi_4(k_1 t_1, k_2 t_2; JT; \zeta_{\alpha}) \quad (48)$$

alakba, ahol ψ_4 a 4 nukleon egy speciális



$$= |12(k_1 t_1) 34(k_2 t_2) JT; \{r_i; \sigma_i \tau_i\} i = 1 \dots 4\rangle \quad (49)$$

kapcsolódású (nem feltétlenül antiszimmetrikus) hullámfüggvénye, míg a rendkívül szimbolikusan felírt h_{β} kifejtési együttható úgy „operál” [38] ψ_4 -en, hogy visszakapjuk az eredeti Ψ_{β} -t. h_{β} természetesen összegezésre vonatkozó utasításokat, részleges származási együtthatókat (cfp-eket) is tartalmazhat és az $(n_1 n_2 n_3)$ partíciók szerint jellemezhető. Az $(n_1 n_2 n_3) = (112), (022), (202), (220); (310), (301), (031); (400), (040), (004)$ partíciók esetén [38]:

$$\begin{aligned} h_{\beta} = & \delta_{N_0 2} + (\delta_{N_0 3} + \delta_{N_0 4}) \sum_{k'=|J-j|}^{J+j} \sum_{s'\tau'x'} \langle 4JT(s\tau) \times | \rangle 3k't'(s'\tau')x'; j^{\frac{1}{2}} \rangle \times \\ & \times \delta_{t'\frac{1}{2}} \delta_{t_1 \frac{1+(-1)^{k_1}}{2}} \delta_{t_2 t_1} \sum_{k_1=|k'-j|}^{k'+j} \sum_{s_1 \tau_1 x_1} \langle 3k't'(s'\tau')x' | \rangle 2k_1 t_1 (s_1 \tau_1) x_1; j^{\frac{1}{2}} \rangle \times \\ & \times \sum_{k_2 t_2} U(k_1 j J j; k' k_2) U\left(t, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; t' t_2\right), \end{aligned} \quad (50a)$$

ahol $N_0 = \max(n_1, n_2, n_3)$, $j = 5/2$ az $i = 3$ d -héjon, $j = 1/2$ az $i = 1, 2$ p -, ill. s -héjon, U a Racah átcsatolási együttható [39] és a $\langle n \dots | \rangle n-1 \dots$ szimbólumok a ZBM héjmodell n -részecske részleges származási együtthatóit jelölik [41], amelyek számunkra szükséges értékeit a 3. táblázat tartalmazza.

Abban az esetben, amikor az $(n_1 n_2 n_3)$ nukleoneloszlás a $(130), (103), (013); (121), (211)$ számhármassokkal jellemezhető, h_{β} -t némi cfp technikával [3], és az ekvivalens, ill. nem-ekvivalens operátorok átcsatolásával [39, 37] kézzel is ki lehet értékelni. Pl. $N_0 = 3$ esetben

$$h_{\beta} = (-1)^{j+\frac{1}{2}-J} \frac{\delta_{t_1 t_2}}{\sqrt{2}} \left(-\delta_{k_1 0} \delta_{t_1 1} + \delta_{k_1 1} \delta_{t_1 0} \sum_{k_2} U\left(1 \frac{1}{2} J j; \frac{1}{2} k_2\right) \right), \quad (50b)$$

ahol j az egyedül álló részecske impulzusmomentumát jelöli.

c) A HO hullámfüggvény definíciója [26, 31]

$$\varphi_{nlm}(\mathbf{r}; v) = R_{nl}(r, v) Y_l^m(\hat{r}), \quad (51a)$$

3. TÁBLÁZAT
Az ASA kiszámításához felhasznált cfp értékek

Héj	n	$2J$	$2T$	$s\tau$	x	$n-1$	$2J_0$	$2T_0$	$s_0\tau_0$	x_0	$\langle nJT(st)x \rangle n-1 \quad J_0 T_0 (s_0\tau_0) x_0$
1/2	3	1	1	11	1	2	0	2	00	1	-0,70711
						2	2	0	20	1	0,70711
	4	0	0	00	1	3	1	1	11	1	1,0
5/2	3	1	1	31	1	2	4	2	22	1	-0,70711
						2	6	0	20	1	0,70711
						2	2	0	20	1	-0,63245
						2	4	2	22	1	-0,37796
						2	6	0	20	1	-0,31623
						2	8	2	22	1	-0,59761
	3	5	1	11	1	2	0	2	00	1	-0,62361
						2	2	0	20	1	0,26726
						2	4	2	22	1	-0,19921
						2	6	0	20	1	0,40825
						2	8	2	22	1	-0,26726
						2	10	0	20	1	0,51177
	3	5	1	31	1	2	2	0	20	1	0,33806
						2	4	2	22	1	-0,56695
						2	6	0	20	1	-0,55943
						2	8	2	22	1	0,42258
						2	10	0	20	1	0,26972
	3	7	1	31	1	2	2	0	20	1	0,24744
						2	4	2	22	1	-0,70711
						2	6	0	20	1	0,35635
						2	10	0	20	1	-0,55838
	3	7	1	31	2	2	2	0	20	1	0,47380
						2	6	0	20	1	-0,51177
						2	8	2	22	1	-0,70711
						2	10	0	20	1	-0,11664
	3	9	1	31	1	2	4	2	22	1	-0,62678
						2	6	0	20	1	0,37268
						2	8	2	22	1	-0,32733
						2	10	0	20	1	0,60093
	4	0	0	00	1	3	5	1	11	1	1,0
	4	0	0	40	1	3	5	1	31	1	1,0
	4	4	0	22	1	3	1	1	31	1	0,19365
						3	3	1	31	1	-0,14638
						3	5	1	11	1	0,75593
						3	5	1	31	1	0,26893
						3	7	1	31	1	-0,38730
						3	9	1	31	1	0,38382
	4	4	0	40	1	3	1	1	31	1	-0,05711
						3	3	1	31	1	-0,53701
						3	5	1	31	1	-0,27762
						3	7	1	31	1	0,05473
						3	7	1	31	2	0,78921
						3	9	1	31	1	0,07376
	4	4	0	40	2	3	1	1	31	1	0,59936
						3	3	1	31	1	-0,06694
						3	5	1	31	1	-0,19058
						3	7	1	31	1	0,62293
						3	7	1	31	2	-0,15299
						3	9	1	31	1	0,43418
	4	6	0	40	1	3	1	1	31	1	0,37796
						3	3	1	31	1	-0,29881

3. TÁBLÁZAT (folytatás)

Héj	n	$2J$	$2T$	s	x	$(n-1)$	$2J_0$	$2T_0$	$s_0\tau_0$	x_0	$\langle nJT(sr)x (n-1)J_0T_0(s_0\tau_0)x_0\rangle$
						3	5	1	31	1	-0,59761
						3	7	1	31	1	-0,30952
						3	7	1	31	2	-0,27355
						3	9	1	31	1	-0,08909
						3	11	1	31	1	0,48181
	4	8	0	22	1	3	3	1	31	1	-0,17252
						3	5	1	11	1	0,75693
						3	5	1	31	1	-0,14940
						3	7	1	31	2	-0,28868
						3	9	1	31	1	0,14940
						3	11	1	31	1	-0,35355
						3	13	1	31	1	0,38188
	4	8	0	40	1	3	3	1	31	1	-0,62412
						3	5	1	31	1	0,24022
						3	7	1	31	1	0,38957
						3	7	1	31	2	0,20797
						3	9	1	31	1	0,19655
						3	11	1	31	1	0,46412
						3	13	1	31	1	0,32204
	4	8	0	40	2	3	3	1	31	1	-0,05770
						3	5	1	31	1	0,34979
						3	7	1	31	1	-0,67229
						3	7	1	31	2	0,04389
						3	9	1	31	1	0,64355
						3	11	1	31	1	0,05375
						3	13	1	31	1	-0,05805
	4	12	0	40	1	3	7	1	31	2	-0,63960
						3	11	1	31	1	0,65044
						3	13	1	31	1	0,40967
	4	12	0	40	2	3	7	1	31	1	-0,33333
						3	7	1	31	2	-0,17408
						3	9	1	31	1	0,70353
						3	11	1	31	1	-0,43452
						3	13	1	31	1	0,41812

ahol a radiális rész definíciója

$$R_{nl} = \frac{2^{\frac{1}{2}(l+2-n)} v^{3/4}}{\pi^{1/4}} \frac{[(2l+2n+1)!!/n!]^{1/2}}{(2l+1)!!} (vr^2)^{\frac{1}{2}l} e^{-\frac{1}{2}vr^2} L_{nl}(vr^2) \quad (51b)$$

ahol

$$L_{nl}(vr^2) = \sum_{k=0}^n (-2)^k \binom{n}{k} \frac{(2l+1)!!}{(2l+2k+1)!!} (vr^2)^k. \quad (51c)$$

d) Az α -részecske belső hullámfüggvénye

$$\chi_{\alpha}(\xi_{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{8}} \Phi_{\alpha}^{\text{orb}}(\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3) \chi_{\text{ast}}(\{\sigma_i \tau_i\}; i = 1, \dots, 4) \quad (52a)$$

egy szimmetrikus térszerű résszel [26]:

$$\Phi_{\alpha}^{\text{orb}} = \prod_{i=1}^3 \varphi_{000}(\varrho_i; v_{0\alpha}), \quad (52b)$$

ahol $v_{0\alpha} = 0,625 \text{ fm}^{-2}$ és egy antiszimmetrikus spin-izospin résszel [41]:

$$\begin{aligned} \chi_{ast} = & \frac{1}{\sqrt{6}} [-\chi_{00}(\sigma_1 \sigma_2) \chi_{00}(\sigma_3 \sigma_4) \{\chi_{11}(\tau_1 \tau_2) \chi_{1-1}(\tau_3 \tau_4) + \chi_{1-1}(\tau_1 \tau_2) \chi_{11}(\tau_3 \tau_4)\}] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{6}} [\chi_{00}(\sigma_1 \sigma_3) \chi_{00}(\sigma_2 \sigma_4) \{\chi_{11}(\tau_1 \tau_3) \chi_{1-1}(\tau_2 \tau_4) + \chi_{1-1}(\tau_1 \tau_3) \chi_{11}(\tau_2 \tau_4)\}] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{6}} [-\chi_{00}(\sigma_1 \sigma_4) \chi_{00}(\sigma_2 \sigma_3) \{\chi_{11}(\tau_1 \tau_4) \chi_{1-1}(\tau_2 \tau_3) + \chi_{1-1}(\tau_1 \tau_4) \chi_{11}(\tau_2 \tau_3)\}] \end{aligned} \quad (52c)$$

írható le, ahol χ_{00} a szingulett spinfüggvényt, míg χ_{1m} a triplett izospin függvényt [3] jelenti. Az (52c) spin-izospin hullámfüggvény a $\sigma_i \sigma_j$ spin-, ill. a $\tau_i \tau_j$ izospin-koordinátákat felcserélő P_{ij} kicserélődési operátor bevezetésével formálisan a

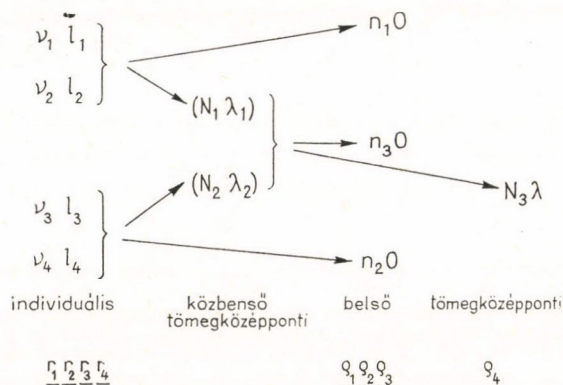
$$\chi_{ast} = -\frac{1}{\sqrt{6}} (P_{34} P_{23} - P_{23} + 1) \chi_{00}(\sigma_1 \sigma_2) \chi_{00}(\sigma_3 \sigma_4) (1 + P_{13} P_{24}) \chi_{11}(\tau_1 \tau_2) \chi_{1-1}(\tau_3 \tau_4) \quad (52d)$$

alakban is írható [30].

Most már tisztában vagyunk a (44)-es egyenlet jelentésével, ezért hozzáfoghatunk annak programozható alakra való redukálásához. Előbb azonban a (48) és (46c) egyenletek kihasználásával (44)-nek egy praktikusabb alakját adjuk a következő módon:

$$\begin{aligned} A_{NL}^{ZBM}(^{16}\text{O}(J^{\pi}T=0), ^{12}\text{C}_{gs}) = & \left(\frac{16}{12}\right)^{N+\frac{L}{2}} \sum_{\beta} c_{\beta} \delta_{T0} \times \\ & \times h_{\beta}(^{16}\text{O}(J^{\pi}T=0), ^{12}\text{C}_{gs}; k_1 t_1, k_2 t_2; J0) a_{NL}(k_1 t_1, k_2 t_2; J0), \end{aligned} \quad (53)$$

ahol δ_{T0} kihangsúlyozza, hogy az ASA-kat az oxigén zérus izospinú (izoskalár) állapotaira számoljuk. (53)-ban megjelent az a_{NL} speciális α -spektroszkópiai amplitúdó (SASA), amelynek definíciója és kiszámítása a Függelékben található.



10. ábra

A Függelékbeli (A 17)-es eredményt felhasználva számítógéppel könnyen kiszámíthatjuk az oxigén atommag különböző $[J_i^\pi, T=0]$ gerjesztett állapotaihoz tartozó ASA-kat tetszőleges $v_0/v_{0\alpha}$ viszony esetére. A következő alfejezetekben az ASA-ra kapott eredményeket mutatjuk be és megvizsgáljuk ezeknek a mag konfigurációtól (ZBM héjmodell c_β együtthatóitól), és a magmérettől ($v_0/v_{0\alpha}$ aránytól), valamint a $\langle \beta$ konfiguráció/ α -részecske konfiguráció \rangle átfedéstől való függését, valamint diszkutáljuk információtartalmukat.

3.2. ASA eredmények az $^{16}\text{O } J_i^\pi = (0^+, 1^-, 2^+, 3^-, 4^+, 6^+)_{i=1-4}, T=0$ állapotaira

A 4. táblázatban felsoroltuk az $^{16}\text{O } J_i^\pi = (0^+ 1^- 2^+ 3^- 4^+ 6^+)_{i=1-4}, T=0$ spinparitású izoskalár ZBM állapotaira kapott ASA értékeinket. Az eredményeket két $v_0/v_{0\alpha}$ arányra közöltük: (i) $v_0 = v_{0\alpha}$ esetére, mert az irodalombeli ASA számolások [45, 31], amelyek az LS csatolású $SU(3)$ klasszifikációjú HO modellen [24] alapulnak, erre az esetre lettek elvégezve s így mód nyílik a részleges összehasonlításra; (ii) $v_0/v_{0\alpha} = (4/16)^{1/3}$ esetére, mert ez az arány felel meg a tényleges fizikai magméreteknek [46].

A 4. táblázat első négy oszlopa rendre a $^{16}\text{O } J_i^\pi$ spinparitását, az adott J^π állapot energia szerinti i sorszámát, a kísérletileg mért E_{exp} összenergia értékeket és az ehhez kapcsolható számított E_{ZBM} héjmodell energia értékeket tartalmazza. A következő öt oszlop a különböző N kvantumszám esetén kapott ASA-kat tartalmazza, majd a következő oszlop az ún. S_J α -spektroszkópiai faktorokat tünteti fel. Ezek az értékek mind a $v_0 = v_{0\alpha}$ esetre vonatkoznak. A táblázat további oszlopai ismét az ASA-kat illetve a hozzá tartozó S_J -ket tartalmazza a $v_0/v_{0\alpha} = (4/16)^{1/3}$ esetre.

3.3. Az ASA eredmények diszkussziója

3.3.1. Az α -spektroszkópiai faktorok információtartalma

A 285. oldalon található definícióval összhangban a spektroszkópiai faktor nem más, mint a megfelelő ASA-k N -re vonatkozó négyzetösszege, azaz

$$S_J = \sum_N A_{NJ}^2. \quad (54a)$$

Ezzel a definícióval a FDWBA azon elképzelése is találkozunk (l. (26b) egyenlet), amely szerint csak egy A_{NJ} dominálna a többi A_{NJ} felett s így a számolt és mért $d\sigma/d\Omega$ differenciális hatáskeresztmetszet közti eltérést áthidaló faktor az S_{exp} spektroszkópiai faktor

$$S_{\text{exp}} \sim A_{NJ}^2 \quad (54b)$$

lenne. Azonban a 4. táblázatban közölt eredményekből kitűnik, hogy ez az elképzelés csak néhány állapotra, a $0_2^+, 1_2^-, 3_2^-, 4_3^+$ és 4, ill. a $6_{1,2}^+$ és 3 ZBM héjmodell állapotokra jogos. A többi állapotra vezető α -transzfer esetén ezek szerint a FDWBA elmélet nem alkalmazható s a MDWBA elméletet kell használni a (39) alatti javaslatnak megfelelően (l. 4. fejezet).

4. TÁBLÁZAT

A $^{16}\text{O}^*[J_i^{\pi}, T=0]$ állapotaira kapott A_{NJ} α -spektroszkópiai amplitúdó értékek és S_J α -spektroszkópiai faktor értékek $v_0 = v_{0\alpha}$ és $v_0/v_{0\alpha} = (4/16)^{1/3}$ esetre. A táblázat részletes magyarázatát l. a 3.3. fejezetben

	$A_{NJ}^{\text{ZBM}}(v_0=v_{0x})$								$A_{NJ}^{\text{ZBM}}v_0/v_{0x}=(4/16)^{1/3}$						
J_i	i	E_{exp}	E_{ZBM}	N=0	N=1	N=2	N=3	N=4	S_J	N=0	N=1	N=2	N=3	N=4	S_J
6_i^+	4	(21,2)	22,55	-0,026	0,125	0	0	0	0,02	0,180	0,111	0	0	0	0,05
	3	19,3	20,99	-0,066	-0,01	0	0	0	0,00	-0,130	-0,009	0	0	0	0,09
	2	16,2	17,82	-0,153	-1,66	0	0	0	2,8	0,277	-1,47	0	0	0	2,24
	1	14,8	12,30	-1,75	0,163	0	0	0	3,1	-1,60	0,145	0	0	0	2,58
4_i^+	4	14,4	15,01	0	-0,118	-0,471	0	0	0,24	0,074	-0,029	-0,418	0	0	0,18
	3	13,8	13,46	0	-0,112	-0,647	0	0	0,43	0,045	0,018	-0,575	0	0	0,33
	2	11,1	12,03	0	-0,524	-0,615	0	0	0,65	-0,016	-0,295	-0,546	0	0	0,39
	1	10,3	10,66	0	-0,547	0,951	0	0	1,20	0,162	-0,788	0,845	0	0	1,36
3_i^-	4	13,1	16,55	0	0,012	-0,038	0	0	0,00	0,006	0,036	-0,034	0	0	0,00
	3	11,6	15,30	0	0,002	-0,019	0	0	0,00	-0,009	0,016	-0,017	0	0	0,00
	2	(11,4)	13,06	0	-0,130	-0,779	0	0	0,62	0,016	0,007	-0,692	0	0	0,48
	1	6,13	5,83	0	0,268	-0,446	0	0	0,27	-0,114	0,388	-0,396	0	0	0,32
2_i^+	4	13,02	12,7	0	0	-0,246	-0,206	0	0,10	0,007	-0,003	-0,161	-0,183	0	0,06
	3	11,52	11,77	0	0	0,009	-0,143	0	0,02	-0,004	0,074	0,000	-0,127	0	0,02
	2	9,85	10,27	0	0	-0,265	-0,153	0	0,09	-0,020	0,028	-0,219	-0,135	0	0,07
	1	6,92	7,39	0	0	0,231	-0,703	0	0,55	0,006	-0,101	0,436	-0,624	0	0,59
1_i^-	4	(?)	16,17	0	0	0,093	-0,001	0	0,01	-0,006	-0,007	-0,005	-0,001	0	0,00
	3	12,4	12,47	0	0	0,050	-0,041	0	0,00	0,001	0,002	0,099	-0,036	0	0,01
	2	9,60	12,25	0	0	0,114	0,372	0	0,15	-0,002	0,015	0,083	0,330	0	0,12
	1	7,12	6,90	0	0	0,192	-0,223	0	0,09	-0,009	-0,023	0,201	-0,198	0	0,08
0_i^+	4	12,05	12,48	0	0	-0,035	0,039	0,003	0,00	-0,002	0,007	-0,009	-0,014	0,003	0,00
	3	(11,26)	10,68	0	0	0,039	0,079	0,070	0,01	0,002	-0,006	0,028	0,106	0,062	0,02
	2	6,05	6,19	0	0	0,040	0,030	-0,244	0,06	-0,000	-0,016	0,014	0,052	-0,217	0,05
	1	0	0	0	0	-0,110	0,054	-0,052	0,02	-0,004	0,041	-0,122	0,064	-0,046	0,023

Az (54a)-val definiált S_J spektroszkópiai faktorok azonban felvilágosítást adhatnak a megfelelő J_i^π magállapotoknak α -transzfer reakciókkal történő könnyű vagy nehéz benépesíthetőségéről, azaz bizonyos J_i^π magállapotok erős vagy gyenge populálódásáról, azaz benépesítési erősségéről, a hatáskeresztmetszetek viszonylagos nagyságáról. Ugyanis minél nagyobb A_{NJ} -k tartoznak egy bizonyos J_i^π állapothoz, akkor — egymást erősítő interferencia esetén — annál nagyobb lesz a számolt hatáskeresztmetszet értéke és természetesen az (54a) spektroszkópiai faktor értéke is. Amennyiben tehát a számított hatáskeresztmetszet a valóság lényeges részét tartalmazza, (azaz, az elméleti leírás közelítései megállják a helyüket), akkor várható, hogy a megfigyelt benépesítési erősségek a számolt S_J -knek megfelelően változnak. Ha tehát a megfigyelt benépesítési erősségnek megfelelnek bizonyos S_J -k, akkor nagy valószínűséggel feltételezhetjük, hogy abban az állapotban a (39)-beli koherens összegnek erősítő hatása van. Ha viszont bizonyos S_J -k nem illenek bele a transzfer kísérletekből nyerhető állapotbenépesítő aránysorozatba, ennek oka lehet a (39)-beli destruktív interferencia is. Mindezek előrebecsátása után közöljük azokat a kísérletekből nyert megállapításokat, amelyek összevethetők a 4. táblázat-beli eredményeinkkel:

1. Tapasztalták, hogy az ^{16}O pozitív paritású állapotai közül a

$$\{0_2^+ 2_1^+ 4_1^+ 6_2^+\} \quad (54c)$$

állapotsorozat erősebben gerjeszthető α -transzfer reakcióval, mint a többi pozitív paritású állapot [47]. Ha megnézzük a 4. táblázat S_J értékeit a $J_i^\pi = (0_i^+, 2_i^+, 4_i^+, 6_i^+)$, $i=1-4$ állapotokra, akkor azt látjuk, hogy éppen az (54c) alatti sorozat választódik ki belőle [48], ha egy J_i -n belül a legerősebb S_J -t tekintjük a kiválasztás alapjának. (A 6_1^+ állapotok esetén az $S_{6_1^+}$ spektroszkópiai faktor ugyan egy kicsit nagyobb a 6_2^+ -re vonatkozóénál, azonban mindkettő óriási a többi $S_{6_1^+}$ állapothoz viszonyítva.)

2. Ugyancsak kísérleti tény az is, hogy létezik egy

$$\{0_4^+ 2_3^+ 4_3^+ 6_1^+\} \quad (54d)$$

állapot sorozat is az ^{16}O -ben, amelyek tagjai csak gyengén gerjeszthetők, kivéve a 6_1^+ -es állapotot, ami viszont erősen gerjed [49]. Táblázatunk S_J értékeinél is megfigyelhetjük ezt a jelenséget [48]; a 6_1^+ állapot S_J értékének kiugrása különösen említésre méltó.

3. Az is kísérleti tapasztalat, hogy az 1_1^- és 1_2^- állapotok hatáskeresztmetszeteinek a viszonya $2/3$ [50]. A 4. táblázatból látjuk, hogy az $S_{1_1^-}/S_{1_2^-}$ arány $v_0/v_{0\alpha} = (4/16)^{1/3}$ esetre éppen $2/3 = 0,67$ -tel egyenlő, míg $v_0 = v_{0\alpha}$ esetre $0,60$ -nal.
4. A kísérletek szerint a $3_1^-/0_2^+$ $6,13/6,05$ MeV energiadublettre vezető α -transzfer reakciók d_{2+1} hozama főként a 3_1^- szint benépesüléséből ered [52]. Ennek nem mond ellent a 4. táblázatból kapható $S_{3_1^-}/S_{0_2^+} = 6,4$ arány sem [48].
5. Bár a $2_1^+/1_1^-$ $6,92/7,12$ MeV energia-dublett tagjai külön-külön már meg lettek említve, azonban a kísérleti irodalomban nem találtuk kihangsúlyozva azt, hogy a hozam főként a 2_1^+ -es szintből ered. Ez a 4. táblázatból kétséget kizáró módon megjósolható, de nyilvánvalóan látható az 5. ábrán bemutatott kísérleti d -spektrum-ból is.

Mindezek a kísérletekkel való egyezések arra bátorítanak bennünket, hogy továbbljunk; nevezetesen az eddigi módszer alapján jóslásokat tegyünk az

α -transzfer reakciókban eddig még észre nem vett jelenségekre vonatkozóan. Ezek szerint olyan S_J értékeket kellene találni, amelyek elég erősek a környező állapotok S_J -éhez képest, ugyanakkor energiában nincsenek nagyon messze az alapállapottól, mivel minél magasabban fekszik egy állapot, annál nehezebben figyelhető meg kísérletileg a sokféle bomlási lehetőség (nyitott csatornák) miatt. Érdekes módon azt találjuk, hogy a már tárgyalt S_J értékeken kívül mindössze kettő, az $S_{3_2^-}$, ill. az $S_{4_2^+}$ értékek jöhetnek számításba. Bár a 4_2^+ -es állapotra vezető átmenet hatáskeresztmetszetét nem mérték meg, az 5. ábrán kétséget kizárólag látszik, hogy az állapot ($^6\text{Li}, d$) reakcióval történő benépesítése rendkívül erős, vetekszik a 4_1^+ -es nívó benépesítési erősségével. A 3_2^- állapotra a jóslást az nehezíti meg, hogy nem ismeretes a pontos energiája [4], továbbá az, hogy a 3_1^- állapothoz képest elég magasan fekszik energiában. Mindenesetre a 4. táblázatban látható $S_{3_2^-} = 0,48$ viszonylag magas érték alapján megkockáztatható az előbbieket figyelembevételével az a jóslás, hogy ez az állapot α -transzfer reakciókkal körülbelül hasonló erősséggel népesíthető be, mint a 3_1^- állapot.

3.3.2. ASA értékeinek összehasonlítása az $SU(3)$ modellből nyert eredményekkel

Ezek után megvizsgáljuk a magszerkezethez közelebb álló ASA értékek információtartalmát. Elsőként megpróbáljuk összehasonlítani ASA értékeinket az irodalomban fellelhető más ASA eredményekkel.

Az irodalmi ASA számolások többnyire a ^{20}Ne vagy ennél nehezebb magokra lettek közölve az $SU(3)$ modellt [24] alapul véve (l. pl. [45]). Egyetlen számolás van csak ^{16}O -re [31], de itt is csak részleges összehasonlítást lehet tenni az $SU(3)$ és a ZBM héjmodellek közti klasszifikációs különbség miatt. Az összehasonlítható értékeket az 5. táblázatban soroljuk fel. A táblázat 3. oszlopában a ZBM héjmodellel alapuló ASA értékeket tüntettük fel, míg a 4. oszlopban az irodalomban fellelhető [31], az $SU(3)$ HO LS-csatolású héjmodell alapján kapott értékeket.

5. TÁBLÁZAT

A ZBM α -spektroszkópiai amplitúdók összehasonlítása az $SU(3)$ modellből nyert értékekkel.
A táblázat részletes magyarázata a 3.3.2. fejezetben található

J^π	N	$v_0 = v_0 \alpha$					
		$A_{NJ}^{\text{ZBM}}(J_i^\pi)$	$A_{NJ}^{\text{SU}(3)}$	$A_{NJ\beta}$	β	$n_1 n_2 n_3$	$np - nh$
0^+	2	$-0,110 (0_1^+)$	$-0,544$	$-0,135$	1	004	$0p-0h$
	3	$0,079 (0_2^+)$	$0,422$	$0,103$	2	022	$2p-2h$
	4	$-0,244 (0_3^+)$	$0,494$	$0,101$	7	220	$4p-4h$
2^+	2	$-0,265 (2_2^+)$	$-0,343$	$-0,267$	1	022	$2p-2h$
	3	$-0,703 (2_1^+)$	$-0,0483$	$-0,466$	13	310	$4p-4h$
3^-	1	$0,268 (3_1^-)$	$0,211$	$0,318$	1	103	$1p-1h$
4^+	1	$-0,524 (4_2^+)$	$0,129$	$0,052$	4	202	$2p-2h$
	2	$0,951 (4_1^+)$	$0,455$	$0,485$	6	220	$4p-4h$
6^+	0	$-1,75 (6_1^+)$	$0,363$	$-1,76$	1	202	$2p-2h$
	1	$-1,66 (6_2^+)$	$-0,400$	$-0,460$	5	400	$4p-4h$

A két oszlop közötti egyezés sok esetben meglehetősen rossz. Különösen az előjelbeli eltérések érdemelnek figyelmet. Mindezen eltérések oka nyilvánvalóvá válik, ha figyelembe vesszük a ZBM és SU(3) héjmodell közti szemléletbeli különbséget. A ZBM héjmodellben egy adott J_i^π állapot esetén az adott N -nek megfelelő összes β konfiguráció járulékot ad A_{NJ}^{ZBM} -hez, azaz a lehetséges különböző konfigurációk keverednek. Az SU(3) héjmodell viszont egy előre megadott, lerögzített konfiguráció esetén működik. Ezért (53)-at, ill. (44)-et átírva a

$$A_{NJ}^{\text{ZBM}}(^{16}\text{O}(J_i^\pi, T=0), ^{12}\text{C}_{gs}) = \sum_{\beta} c_{\beta}^{(i)} A_{NJ\beta} \quad (55)$$

alakba, jobb egyezést várhatunk, ha az SU(3) ASA-kal valamelyik, „konfigurációban hozzá közel álló” $A_{NJ\beta}$ -t vetjük össze. Az idézőjelbe tett kifejezés azt jelenti, hogy az egyes összehasonlítandó konfigurációk csak részben felelnek meg egymásnak az SU(3), ill. ZBM modellben (elég, ha csak a különböző — LS , ill. jj — csatolási sémákra gondolunk), ezért nem várhatunk számszerű egyezést az $A_{NJ\beta}$ és $A_{NJ}^{\text{SU}(3)}$ értékek között. Azonban előjel egyezés már elvárható és megnyugtató lenne a magmodellek jelenlegi fejlettségi szintjének szempontjából. Az (55) felbontás szerint az összehasonlításra kiválasztott $A_{NJ\beta}$ értékek az 5. táblázat 5. oszlopában láthatók. A 6. oszlopban megadtuk a β konfigurációt s mellette feltüntettük a hozzátartozó $(n_1 n_2 n_3)$ számhármast, ami a $0d_{5/2}, 1s_{1/2}, 0p_{3/2}$ héjon elhelyezkedő nukleonok számát jelöli. A $(0p_{3/2})^4$ konfigurációt 0-részecske-0-lyuk állapotnak definiálva, az utolsó oszlopban feltüntettük az egyes β konfiguráció részecske-lyuk karakterét. A 4. oszlopban levő $A_{NJ}^{\text{SU}(3)}$ értékek természetesen hasonló jellegű részecske-lyuk állapot esetére lettek számolva [31]. A 4. és 5. oszlop értékei közt már felfedezhető némi hasonlóság. Érdekes viszont megfigyelni, hogy a 0^+ állapotokra és a 4^+ -os 2 részecske—2 lyuk konfigurációra az SU(3) fél nagyságrenddel (5-ös faktossal) nagyobb értékeket szolgáltat abszolút értékben, míg a 6^+ -os 2 részecske—2 lyuk konfigurációra vonatkozó értéket rosszul adja vissza mind nagyságrend, mind előjel tekintetében.

Bár az SU(3) modell nagy sikereket ért el magszerkezet számolásokban, a spektroszkópiai amplitúdókra kapott értékek nem mutattak olyan jellegzetességeket (pl. egy állapot, ill. konfiguráció előnyben részesítését a többi állapottal, ill. konfigurációval szemben), mint amilyeneket a transzfer reakciókból sejteni lehetett [31], s mint amilyeneket az előbbiekben a 4. táblázat kapcsán bemutattunk. A ZBM ASA-ival való sok tapasztalati jelenség megmagyarázhatósága [48, 38], ezenkívül a reakció-amplitúdóbeli koherens összegzés hatásosságában játszott nagy szerepe (1. 4. fejezet) is arra enged következtetni, hogy a ZBM ASA-kat (5. táblázat 3. oszlop, ill. a 4. táblázat A_{NJ} értékei) a valósághoz közelebb álló értékeként lehet felfogni. Meg kell még azt is jegyezni, hogy a konfigurációkeveredés A_{NL} -beli nagyságrend- és előjelváltóztató hatására [31] is felhívta a figyelmet.

3.3.3. Az ASA-kból nyerhető magszerkezeti információk

Ismeretes az, hogy az atommagok gerjesztett állapotainak kialakulásában jelentős szerepe van a magok részecske-lyuk gerjesztés szabadsági fokainak [46]. Amint ezt a 2. fejezetben kifejtettük, az ilyen típusú gerjesztett állapotok kísérleti tanulmányozására legjobb lehetőséget a transzfer reakciók kínálják. Elméletileg pl. héj-

modell számolás útján nyerhetünk az állapotok részecske-lyuk karakteréről információt, ugyanis a c_β héjmodell együtthatók négyzete a β konfigurációk megvalósulásának a valószínűségét adják meg (l. pl. a (43)-as egyenletet) s mindegyik konfiguráció meghatározott részecske-lyuk karakterrel rendelkezik. Azonban van más mód is egy állapot részecske-lyuk karakterének elméleti megállapítására, ugyanis az ASA-kban is tükröződik az állapot eme tulajdonsága [48]. Ennek oka nyilvánvaló, hiszen a maghullámfüggvény szerepel az ASA-k (40) alatti definíciójában (s így természetesen az előbb említett c_β héjmodell együtthatókat is tartalmazzák, amennyiben héjmodell hullámfüggvényt használunk a magállapot leírására). Az ASA-k részecske-lyuk karaktert jellemző tulajdonsága az alábbiakban látható be ψ_4 -nek HO hullámfüggvényekkel való reprezentálása esetén.

A teljes oszcillátor energiakvantum, ami egyik magról a másikra transzferálódik, (A10) és (A12) felhasználásával, az (A7) alatti transzformációnak megfelelően

$$Q \equiv \sum_{i=1}^4 (2v_i + l_i) = 2N + J + 2 \sum_{i=1}^3 n_i \quad (56a)$$

alakban írható. A 11. ábrából továbbá nyilvánvalóvá válik az a tény, hogy az n -részecske— n -lyuk karakter a

$$Q = 4 + n \quad (56b)$$

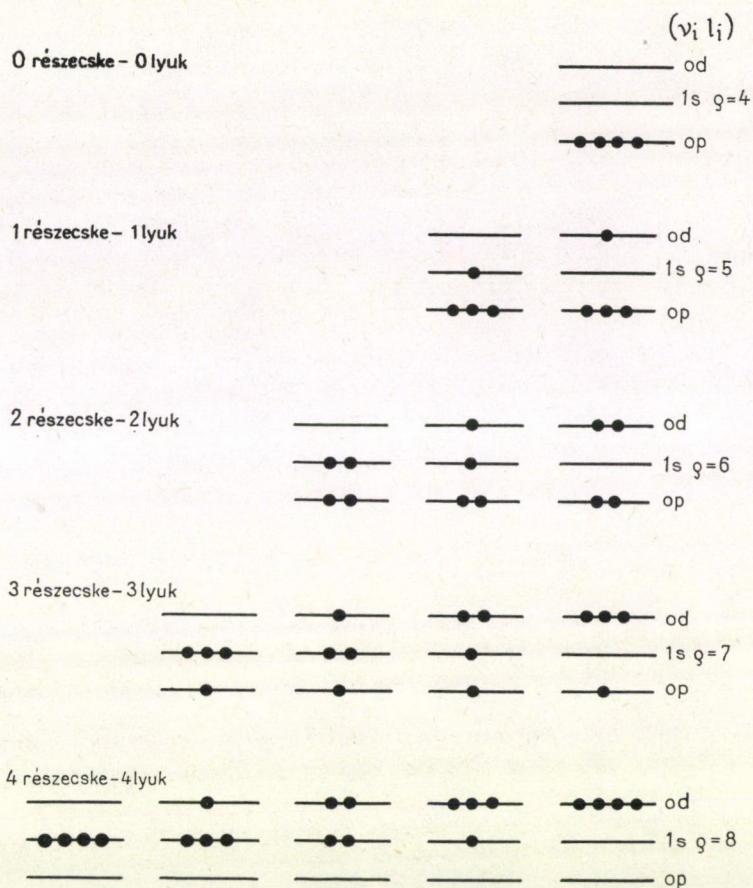
egyértelmű összefüggésben áll a Q átadódó teljes energiakvantummal [48], így az ASA-k indexében szereplő N tömegközépponti mozgás főkvantumszám is összefüggésbe hozható a részecske-lyuk gerjesztéssel a következő módon [48]:

$$2N + J = 4 + n - 2 \sum_{i=1}^3 n_i, \quad \text{ha } v_0 \neq v_{0z}. \quad (56c)$$

Ennek az összefüggésnek a jelentése világos; egy adott típusú n -részecske— n -lyuk állapotba való transzfer esetén az átadódott α -részecske tömegközépponti mozgásának energiájából $2 \sum_{i=1}^3 n_i$ rész az α -részecske belső mozgására fordítódik. Az (A17)

alatti speciális ASA-kra vonatkozó végső kifejezésben viszont azt látjuk, hogy $v_0 = v_{0z}$ esetén az n_i kvantumszámoknak nincs jelentőségük, mivel nem adnak zérustól különböző járulékot az ASA-khoz. Ez természetes is, hiszen saját magunk szabtuk meg eleve azt, hogy a transzfer egy α -részecske alapállapotára korlátozódjon, amikor (39)-ben az α -részecske belső kvantumállapotaira vonatkozó összegzést elhagytuk. Az n_i belső kvantumszámok megjelenését a $v_0 \neq v_{0z}$ esetben csak annak tudhatjuk be, hogy megengedtük a v_0 és v_{0z} paraméterek különbözőségét, azaz figyelembe vettük a szabad és az ^{16}O -beli α -részecske méretbeli különbözőségét. A négyrészecske n_i belső kvantumszámainak megjelenése így a $v_0 \neq v_{0z}$ esetben fizikailag azt jelenti, hogy a méretbeli különbözőségek a belső mozgásbeli szabadsági fokokban oldódnak fel [58]. Méretazonosság, azaz $v_0 = v_{0z}$ esetén az n_i -knek nemcsak az ASA-khoz járulékot nem adó, hanem, (A11), ill. (A12) révén, zérus voltak is kiderül. (56c)-be $n_i = 0$ -t írva azt kapjuk ilyenkor, hogy

$$2N + J = 4 + n \quad \text{ha } v_0 = v_{0z} \quad (56d)$$



11. ábra. A $^{16}\text{O}^*$ ZBM állapotokban előforduló lehetséges részecske-lyuk gerjesztések. (Az (56a) összefüggés szemléltetése)

azaz minden energia a tömegközépponti mozgásra koncentrálódik, és ebben az esetben mindegyik \underline{N} egyértelmű összefüggésben áll az állapot n -részecske— n -lyuk karakterével. A $v_0 = v_{0z}$ esetre vonatkozó N értékeket (56d)-ben és a 4. táblázatban aláhúztuk, hogy ezzel kiemeljük azt a tényt, hogy adott n -részecske— n -lyuk állapot esetén ettől kisebb N (s így a hozzá tartozó ASA) értékek is megjelenhetnek (azaz különbözhetnek zérustól) $v_0 \neq v_{0z}$ esetén (56c) szerint.

A 6. táblázatban összegyűjtöttük [48] az ^{16}O J^π spinű állapotaira vonatkozó N értékeket a lehetséges részecske-lyuk karakterek szerint csoportosítva. A mondtak értelmében tehát a 6. táblázatban szereplő aláhúzott \underline{N} értékek a „fő” N -ek, amelyek $v_0 = v_{0z}$ esetén egyértelműen összefüggnek az állapot részecske-lyuk karakterét megadó 2. oszloppal, mivel ilyenkor a mellette álló N -ek nem lépnek fel, mert a nekik megfelelő A_{NJ} -k zérusok. A csillaggal megjelölt \underline{N} , ill. N értékek előfordulását vagy a Pauli-elv, vagy az impulzusmegmaradás tiltja meg. A 6. táblá-

6. TÁBLÁZAT

Az N nódusszámok értékei az $^{16}\text{O}^*[J]$ állapotaira különböző ($np-nh$) részecske-lyuk gerjesztések esetén (vö. 3.3.3. fejezettel)

q	$np-nh$	$J=0$	$J=1$	$J=2$	$J=3$	$J=4$	$J=6$
4	0p—0h	$\underline{2}, 1, 0$	—	$\underline{1}, * 0^*$	—	$\underline{0}^*$	—
5	1p—1h	—	$\underline{2}, 1, 0$	—	$\underline{1}, 0$	—	—
6	2p—2h	$\underline{3}, 2, 1, 0$	—	$\underline{2}, 1, 0$	—	$\underline{1}, 0$	$\underline{0}$
7	3p—3h	—	$\underline{3}, 2, 1, 0$	—	$\underline{1}, 1, 0$	—	—
8	4p—4h	$\underline{4}, 3, 2, 1, 0$	—	$\underline{3}, 2, 1, 0$	—	$\underline{2}, 1, 0$	$\underline{1}, 0$

zat segítségével most már könnyen megérthetők a 4. táblázatban előforduló zérusok, amelyeknek a számolásokban való kiadódása egyúttal a számítógép program egy-fajta ellenőrzését is jelentette.

Ezek után rátérhetünk az állapotok részecske-lyuk karakterének az A_{NJ} értékekből történő meghatározására. Nyilvánvaló, hogy egy állapot annál erősebb n -részecske— n -lyuk jelleggel rendelkezik, minél nagyobb az (56d) szerinti A_{NJ} érték abszolút értéke a többi A_{NJ} értékekhez viszonyítva. A 4. táblázatban található A_{NJ} értékeknek ebből a szempontból történő analízise úgy végezhető el a legegyszerűbben és a legszemléletesebben, ha az

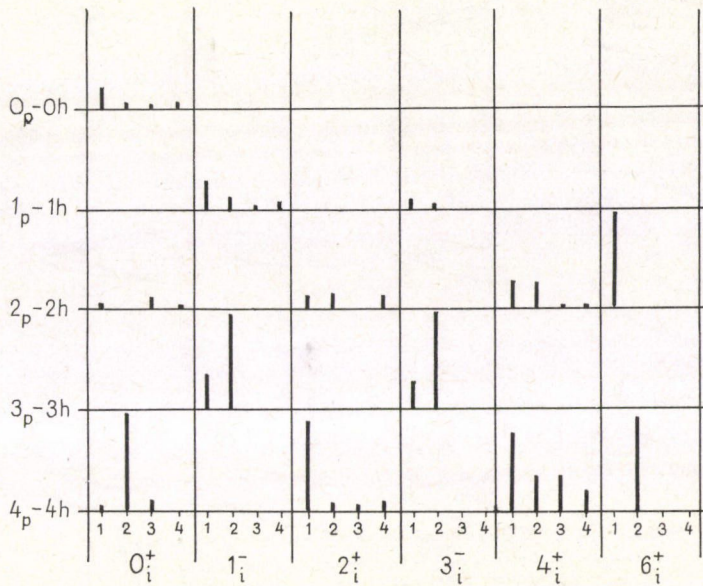
$$A_{NJ}^2_{i=1-4} / (\sum_N A_{NJ}^2_{i=fix})_{\max} \quad (57)$$

arányt ábrázoljuk egy $J_{i=1-4}$ csoporton belül, azaz egy lefixált $J_{i=1-4}$ csoporthoz tartozó legnagyobb abszolút értékű $\sum_N A_{NJ}^2_{i=fix}$ összeggel súlyozzuk az összes

$A_{NJ}^2_{i=1-4}$ értéket. A 12. ábrán láthatjuk az elmondottak megvalósítását, aholis tehát az oszlopok magassága a megfelelő J_i^* állapot n -részecske— n -lyuk szerkezetének erősségét szemlélteti.

A 12. ábrára tekintve rögtön szembeötlik egy erős 4-részecske—4-lyuk jellegű sorozat a $\{0_2^+ 2_1^+ 4_1^+ 6_2^+\}$ állapotokra. Ez az állapot-sorozat éppen megegyezik az (54c) alatti állapotokkal, amelyekről a kísérleti irodalomban éppen az α -transzfer reakciók által történő könnyű benépesíthetőség révén feltételezik, hogy domináló 4-részecske—4-lyuk szerkezettel rendelkeznek [47]. Most a 11. ábrán láthatjuk, hogy ez az ASA-elmélet szerint is így van. A kísérleti irodalomban továbbá felteszik, hogy az (54d) alatt kiemelt $\{0_4^+ 2_3^+ 4_3^+ 6_1^+\}$ ^{16}O állapotsorozat a kétnukleon transzfer reakciók általi könnyű benépesíthetőség miatt 2-részecske—2-lyuk szerkezettel rendelkezik [49]. A 12. ábrára tekintve viszont azt látjuk, hogy a pozitív paritású állapotok között a $\{0_3^+ 2_2^+ 4_2^+ 6_1^+\}$ sorozat rendelkezik relatíve erős 2-részecske—2-lyuk karakterrel. Mivel a héjmodell számolások energianívóinak sorrendje az elmélet közelítő, modell-jellege miatt nem mindig felel meg a kísérleti nívósorozatnak, ezért az előbbi, a kísérleti eredményekből leszűrt állítást elfogadva, a 12. ábra alapján feltételezhető, hogy a $0_3^+ 2_2^+ 4_2^+$ ZBM állapotok rendre a $0_4^+ 2_3^+ 4_3^+$ kísérleti nívóknak felelnek meg [48]. Feltevésre a 0^+ esetben valószínűleg nincs is szükség, mert a mérések szerint a 0_3^+ (11,26) állapot létezése bizonytalan [53].

A 6_1^+ állapot viszont minden további nélkül kiválóan egyezik szerkezetét illetően a kísérletileg megjósolttal.



12. ábra. Az α -spektroszkópiai amplitúdókból a $^{16}\text{O}^*$ állapotok részecske-lyuk szerkezetére kapott információ. Az egyes oszlopok magassága az állapotok n részecske— n lyuk (n^p-nh) karakterét jellemzik

[54] megemlíti, hogy a mérések szerint a ^{16}O alapállapotú hullámfüggvénye valószínűleg 15 %-ban tartalmaz 4-részecske—4-lyuk komponens is a domináló 0-részecske—0-lyuk szerkezet mellett. A 12. ábrán látjuk, hogy kb. ugyanilyen arányban 2-részecske—2-lyuk komponens is tartalmaz az alapállapot [58].

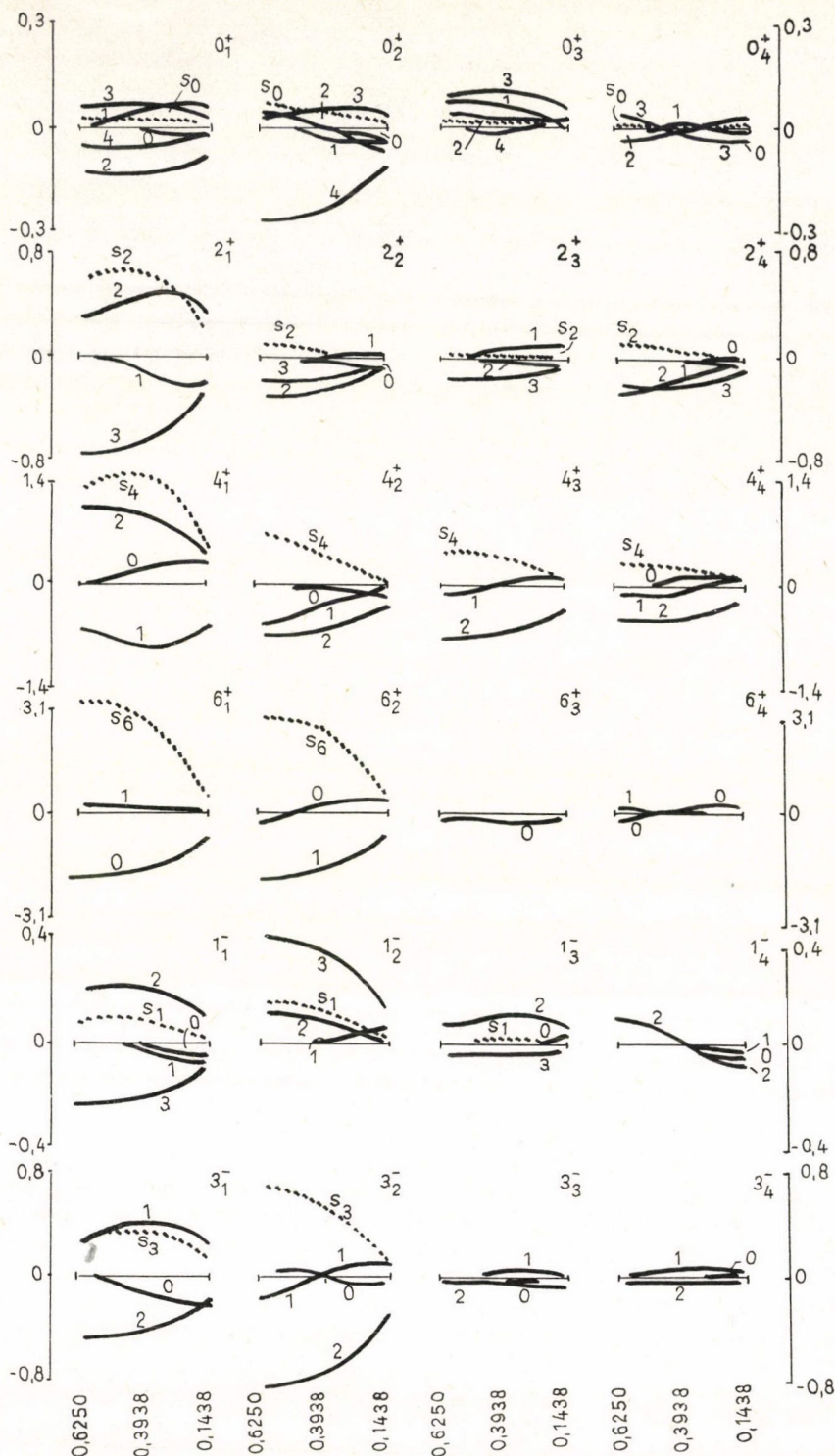
Említést érdemel még a 12. ábrán jól látszó 1_2^- és 3_2^- állapot erős 3-részecske—3-lyuk jellege, valamint az, hogy ezen két állapot szerkezetének kialakításában az 1-részecske—1-lyuk gerjesztések is nagy szerepet játszanak.

3.3.4. Az ASA-k szerkezetének analízise

Az ASA-k értékét lényegében két, egymástól független tényező alakítja ki:

(i) a v_0/v_{0x} oszcillátor paraméter viszony; (ii) a $\Psi_{16\text{O}}^{\text{ZBM}}$ héjmodell állapotfüggvény.

(i) A 13. ábrán az A_{NJ}^{ZBM} amplitúdók v_0 -tól való függése látható oly módon, hogy mindegyik kis ábrán a $v_0=0,6250-0,1438 \text{ fm}^{-2}$ intervallum tartományban ábrázoltuk az ASA értékeket. Mivel a $v_{0x}=0,6250 \text{ fm}^{-2}$ paraméter érték le lett rögzítve, a $v_0=0,3938 \text{ fm}^{-2}$ érték, amely az intervallum közepén, a megjelölt helyen helyezkedik el, megfelel a fizikailag helyes oszcillátor paraméternek. Az ASA-k itt felvett értéke található meg a 4. táblázat jobb oldalán, míg a 4. táblázat közepén található A_{NJ}^{ZBM} értékek az intervallumok elején fedezhetők fel ($v_0=v_{0x}$ eset). Jól látható a 13. ábrán az a már említett tény, hogy ahogy távolodunk a kiindulópontul szolgáló $v_0=v_{0x}$ helytől (tehát, ahogy csökken a v_0/v_{0x} arány, illetve nő az α -részecskét befogadó mag mérete), úgy jelennek meg a meglevő A_{NJ}^{ZBM} amplitúdók mellett az $A_{N<N,j}^{\text{ZBM}}$ amplitúdók. Pl. 0_1^+ esetén megfigyelhető az $N=1$, 1_1^- esetén az

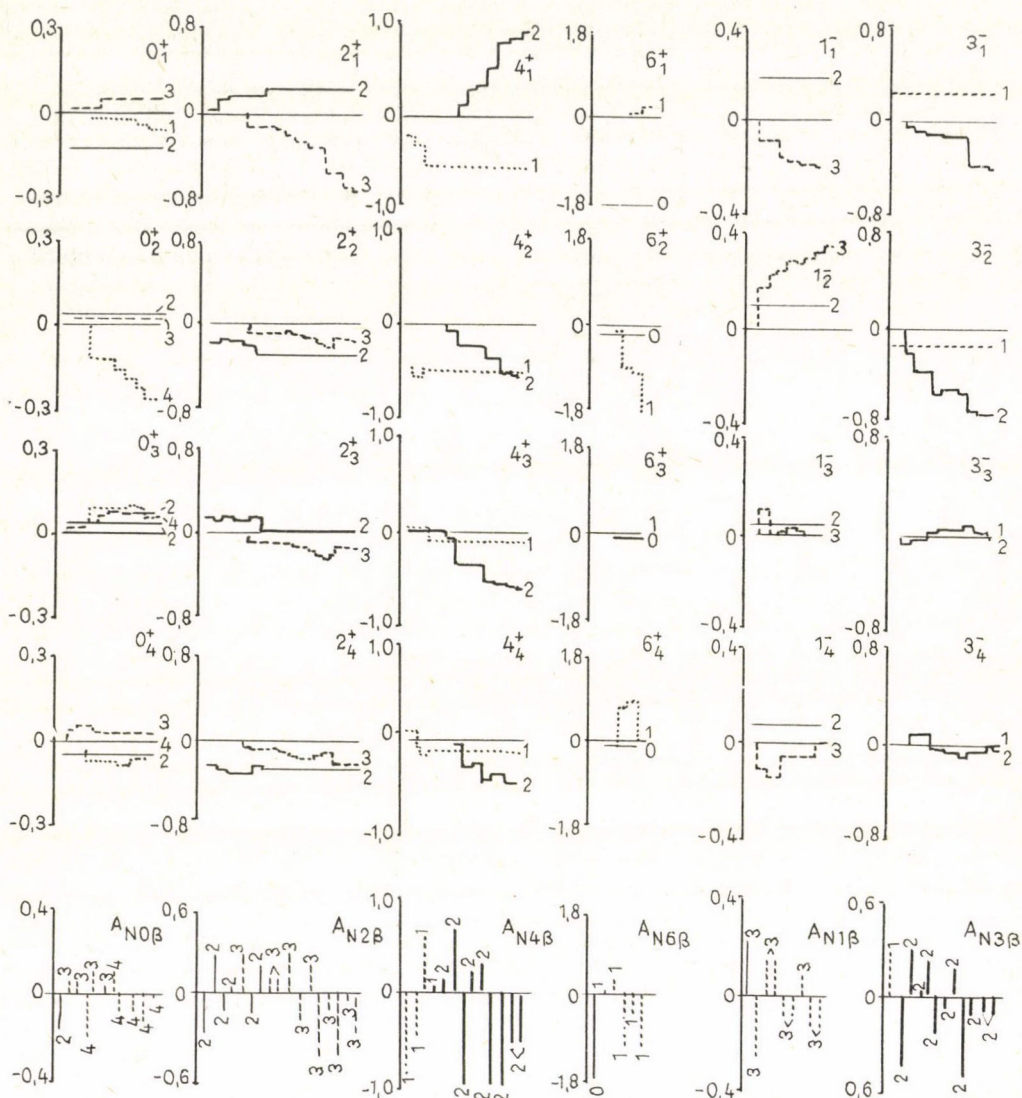


13. ábra. A vizsgált $^{16}\text{O}^*[J_i]$ állapotokhoz tartozó A_{NJ} α -spektroszkópiai amplitúdók függése a v_0 HO paraméter értékektől (folyamatos vonalak). A megfelelő S_J α -spektroszkópiai faktorkok függése v_0 -tól (pontosított vonalak). Részletes magyarázatot l. a 3.3.4. fejezetben.

$N=0$, 1, míg 3_1^- és 4_1^+ esetén az $N=0$ kvantumszámoknak megfelelő amplitúdók. Az is látszik, hogy az intervallum vége felé közeledve az összes amplitúdó zérushoz tart. Ez el is várható, mivel a $v_0/v_{0\alpha}=0,1438/0,625=(4/328)^{1/3}$ arány fizikailag meg lehetőségen nem reális. Az ábrák fő haszna abban van, hogy szemléletesen mutatják az ASA-k változását a v_0 paraméter változásával szemben és az egyes J_i^{π} ($i=1-4$) állapotoknak megfelelő rajzok horizontális elhelyezkedése szemléletesen mutatja azt is, hogy az egyes i állapotokban mely amplitúdók a fontosak a többiekhez képest. Pl. az tűnik ki, hogy általában a 3. és 4. állapot jóval kevésbé fontos (a direkt α -transzfer reakciók szempontjából), mint az $i=1$ és 2 sorszámmal rendelkező energiaállapot. Ez alól talán kivételt képeznek a 4_3^+ és 4_4 , ill. a 0_3^+ és 1_3^- állapotok. Jól látszik az ábrákon az egyes A_{NJ}^{ZBM} -k uralkodó jellege, ami az állapot részecske-lyuk szerkezetével függ össze, amint azt az előbbieken részletesen diszkutáltuk. Pl. a 0_2^+ állapotban uralkodik az A_{40}^{ZBM} amplitúdó, a 6_1^+ -en az A_{06}^{ZBM} , míg a 6_2^+ -n az A_{16}^{ZBM} . Érdekes megfigyelni, hogy több esetben éppen a fizikai v_0 érték ($0,3938 \text{ fm}^{-2}$) környékén tűnnek el az ASA-k. Ez látható a 0_4^+ 1_4^- 6_4^+ állapotok esetén, illetve a 3_2^- és a 4_3^+ állapotokra az $N=1$ jelű ASA-k tűnnek el $v_0 \sim 0,3938 \text{ fm}^{-2}$ környékén. A 13. ábra minden egyes kis rajzán feltüntettük kipontozott vonallal a megfelelő S_J spektroszkópiai faktor értékeket is, amelyek csökkenő jellege jól mutatja az amplitúdók abszolút értékének általános csökkenését a nemfizikaivá váló körülmények (v_0 csökkenése nemrealisztikus értékekre) miatt.

(ii) Mint azt már az (55) alatti felbontásban érzékeltettük, az ASA-k felfoghatók úgy, mint a c_{β} héjmodell konfigurációk együtthatók és a β konfigurációnak olyan α -részecskével alkotott átfedés szorzatösszege, amely α -részecske χ_{α} belső állapotban van és NJ kvantumszámokkal jellemzett mozgást végez a céltárgy-mag körül. Az (55) alatti felbontásban világosan látszik, hogy az ASA i állapotfüggését kizárólag a $c_{\beta}^{(i)}$ héjmodell együtthatók adják meg, míg az $A_{NJ\beta}$ átfedés csak a β konfigurációtól függ. Tanulságos ezért megvizsgálni, hogy vajon az eddig megismert ASA-k milyen módon nyerik az (55) alatti összegzés révén a már jól ismert értékeiket. Ezen cél érdekében elkészítettük a 14. ábrát [38], ahol az egyes rajzok vízszintes tengelyén a J_i^{π} állapotoknak megfelelő konfigurációk sorszáma (N_{β}) vettük fel a ZBM héjmodell szerinti sorrendben [36]. Ezek szerint a vízszintes tengely hosszúságából meg lehet becsülni, hogy egy adott J^{π} állapot hány β konfigurációt tartalmaz (N_{β}^{max}). Pl. látható, hogy a 2^+ állapot tartalmazza a legtöbbet, míg a 6^+ -os a legkevesebbet. Valóban így van ez, ugyanis a $J^{\pi}=0^+, 1^-, 2^+, 3^-, 4^+, 6^+$ állapot rendre $N_{\beta}^{\text{max}}=11, 9, 17, 12, 13, 6$ konfigurációt tartalmaz. Az ábrákon a szaggatott, folyamatos, ill. pontozott jelekkel rajzolt lépcsőfüggvények a különböző $A_{NJ}^{\text{ZBM}}(N_{\beta}) = \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} c_{\beta} A_{NJ\beta}$ összegek értékét jelölik. Természetesen $A_{NJ}^{\text{ZBM}}(N_{\beta}^{\text{max}}) = A_{NJ}^{\text{ZBM}}$, azaz — mivel az ábrák a $v_0=v_{0\alpha}$ esetre vonatkoznak — a lépcsőfüggvények végződése pontosan a 4. táblázatból már megismert A_{NJ}^{ZBM} értékeket szolgáltatják. Ezek mellett a végzések mellett minden esetben egy szám áll, amely a megfelelő N értéket jelöli. A 14. ábra rajzain jól tanulmányozható az (55) alatti koherens összegzés lépésenkénti alakulása. Mint látjuk, a koherencia lehetséges erősítő, ill. gyengítő hatása némely esetben döntő befolyással van a kialakuló ASA értékére. Pl. az 1_3^- , 1_4^- és 6_4^+ állapotokhoz tartozó ASA az egymást gyengítő koherens összegzésnek tudhatja be rendkívül kicsiny voltát, míg a már megismert „nagy” amplitúdók mind egymást erősítő tagok összegeződése folytán jöttek létre.

A 14. ábrán alul a J^{π} (ZBM) állapot egyes konfigurációinak megfelelő



14. ábra. A vizsgált $^{16}\text{O } J_i$ állapothoz tartozó A_{NJ} α -spektroszkópiai amplitúdók értékének alakulása az (55) alatti felbontásnak megfelelően. Az alsó ábrarost oszlopai az (55)-nek megfelelő $A_{NJ\beta}$ értékeket szemlélteti. Részletes magyarázatot l. a 3.3.4. fejezetben

$A_{NJ\beta}$ mennyiségeket tüntettük fel előjel-, és mérethelyes ábrázolásban. Az abszcisszák jelentése és mérete is megegyezik a 14. ábra többi rajzainak abszcisszáival, így módon a 14. ábra használatával eldönthető az is az egyes konkrét esetekben, hogy az erősítést, ill. gyengítést a c_β együttható (amelyet jelen dolgozatban csupán említettünk, de l. [36]) vagy az $A_{NJ\beta}$ átfedési integrál okozza-e. A 14. ábra elemzésével megállapíthatjuk tehát, hogy az $A_{NJ\beta}$ átfedéseknek és a c_β héjmodell együtt-

hatóknak „egyenrangú szerep” jut az ASA végső értékének kialakításában. Ezért nem hagyatkozhatunk csupán a héjmodell konfigurációkra, amikor egyes transzfer reakciók erősségét (valószínűségét) vizsgáljuk. A transzfer reakció valószínűségéért éppen olyan mértékben felelős lehet az átfedési integrál értéke is. Ugyanígy, nem következtethetünk vissza egyértelmű módon a kísérleti spektroszkópai faktor értékekből az állapotfüggvény konfigurációs együtthatóira.

Összefoglalásképpen elmondható tehát, hogy az ASA-kban rendkívül hasznos mennyiséget ismertünk meg, amely érzékeny eszköznek bizonyult mind a magállapotok szerkezeti jellemzésére, mind pedig az α -transzfer reakciókban megfigyelt jelenségek magyarázatára, s ily módon feltételezhetjük [58], hogy az ASA-k megfelelő összekötő kapcsolatot jelenthetnek az elméleti α -transzfer reakció számítás és a kísérleti α -transzfer eredményei között.

Ennek reményében fogunk hozzá a következő fejezethez, ahol ezt a kérdést vizsgáljuk részletesen a különféle $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d_i)^{16}\text{O}(J^\pi, E_i)$ átmenetek mikroszkopikus leírásával.

4. A mikroszkopikus módszer alkalmazása a $^{12}\text{C}_{gs}(^6\text{Li}, d_i)$ átmenetek leírására

4.1. A mikroszkopikus leírás közelítései

A 2.3. fejezetben már elvégeztük a címben foglalt számolásokat a fenomenologikus DWBA-elmélet keretén belül. Jelen fejezetben a 2.4. alattiak értelmében a DWBA elmélet mikroszkopikus* változatát fogjuk alkalmazni ezen átmenetek leírására. Meg kell említeni, hogy kétrészecske transzfer számolások esetén az elmélet mikroszkopikus változata nem minden esetben adott jobb eredményt, mint a fenomenologikus változat [59]. Ez érthető, ha meggondoljuk, hogy a mikroszkopikus leírásmód szükségszerűen közelítő jellegű, ezért előfordulhat olyan eset, amikor a fenomenologikus leírás néhány paraméterének beállítása révén jobban szimulálja a valóságos esetet, mint a mikroszkopikus, noha ez fizikailag mélyebb megértését jelenti a jelenségnek.

A DWBA cluster transzfer számolásunk a következő közelítéseken alapszik:

a) A keletkező $^{16}\text{O}(J^\pi, T)$ magállapotokat a 3. fejezetben ismertetett és felhasznált, számolástechnikai szempontból egzakt [32, 36] ZBM héjmodellel írjuk le. Másképp megfogalmazva, a mikroszkopikus oxigénbeli α -részecske alakfaktorban (l. 17a, 18a egyenlet) a 3. fejezetben kiszámolt és vizsgált $A_{NL}^{ZBM}(^{16}\text{O})$ α -spektroszkópai amplitúdók fognak fellépni.

b) A ^6Li bombázó részecskét szerkezettel nem rendelkező, α - és d -részecskéből összetett kétrészecske rendszernek fogjuk fel. Mivel a ^6Li mag spinje 1, az α - d rendszer relatív állapota (a Pauli-elvet is figyelembe véve) $1S$, ill. $0D$ kvantumszámokkal jellemezhető. További közelítésként az igen kicsi [62] $0D$ komponenst elhagyjuk a ^6Li relatív hullámfüggvényből.

c) A lítium szerkezetére vonatkozó előbbi feltevés teszi lehetővé az ún. zérus hatótávolságú (ZR) közelítés alkalmazását, amely a legáltalánosabban használt közelítés a $(^6\text{Li}, d)$ DWBA számolásokban [79]. Lényegét a 2.3. fejezetben érintettük.

* Helyesebb volna (39) kapcsán „szemi-mikroszkopikus változatról” beszélni, azonban az irodalomban meghonosodott a mikroszkopikus kifejezés [79].

Érdemes megvizsgálni az egyes közelítések jogosságát és fizikai jelentését.

Az első két (a), (b) közelítés lényegében a reakcióban részt vevő magok szerkezetére vonatkozik. Az a tény, hogy a keletkező oxigén magnak szerkezetet tulajdonítunk, a megfelelő spektroszkópiai amplitúdók felléptében fejeződik ki. Ezek az ASA-k teszik a DWBA átmeneti mátrixelemben szereplő alakfaktort pontosabbá (azaz, bonyolultabbá, ahogy ezt az elméleti magfizikában már megszoktuk). ZBM héjmodell hullámfüggvényt használva a különböző oxigénvégállapotok leírására, ezen mag szerkezetét természetesen csak közelítő mértékben vesszük figyelembe. Pl. maximálisan csak 4-részecske—4-lyuk gerjesztésekről ad számot a választott modell, mivel a 16 nukleon közül csak négy lehet aktív. Ez a négy is csak a $0p_{3/2}$, $1s_{1/2}$ és $0d_{5/2}$ egyrészecske héjakon mozoghat. Mindazonáltal a ZBM modell az oxigén és környékének leírására messze az egyik legsikeresebb modell, jóslásait a publikálás óta számos kísérlet támasztja alá. Az előző fejezetben is láttuk, hogy a segítségével számított ASA-k összhangban vannak a kísérleti megállapításokkal. Mindezek alapján remélhetjük, hogy az a) közelítés ésszerű és bevezetése közelebb viszi az alakfaktort az egzakt értékhez.

A ${}^6\text{Li}$ szerkezetére tett b) feltevés lényegében azt jelenti, hogy ennél a magnál megelégszünk a fenomenologikus leírással. Ezt a magot igen sokan vizsgálták elméleti szempontból (l. pl. [61]-ben található irodalmat) és arra a következtetésre jutottak, hogy jó közelítéssel leírható $\alpha-d$ cluster modellel. Ezen elméleti vizsgálatokból továbbá kiderült, hogy az $\alpha-d$ relatív mozgás mindössze 4%-ban tartalmaz $1D$ komponenst [62]. Mindez feljogosít bennünket a b) közelítés használatára.

A harmadik feltevés a ZR közelítés bevezetése, ami a (30a)-s egyenletből láthatóan fizikailag azt jelenti, hogy zérus hatótávolságú erő okozza a transzfert. Alternatív fizikai értelmezése is lehetséges (30)-nak, nevezetesen az, hogy maga a ${}^6\text{Li}$ mag pontszerű és hullámfüggvénye δ -függvénnyel közelíthető. A ${}^6\text{Li}$ mag véges méretének, ill. a kölcsönhatás nem zérus hatótávolságának figyelembevétele eltérést okozhat a $B(\theta)$ dinamikai amplitúdó számolásában.

A ZR közelítésből eredő hibát ki lehetne küszöbölni a (24) alatti „véges hatótávolságú” (FR) mátrixelem egzakt kiszámításával. Ez azt jelentené, hogy elvégeznénk az ott kijelölt 6-dimenziós integrálást. Ez a feladat hazánkban még nem valósítható meg, a rendelkezésre álló számítógépek nem elég gyorsak és nagyok egy ilyen feladat végrehajtására.

A ZR közelítés hibája bizonyos esetekben megbecsülhető a FR korrekciós módszerrel [77], amelyet a 4.3. fejezetben röviden érinteni is fogunk.

A következő fejezetben az alakfaktorokat határozzuk meg.

4.2. A mikroszkopikus alakfaktorok meghatározása

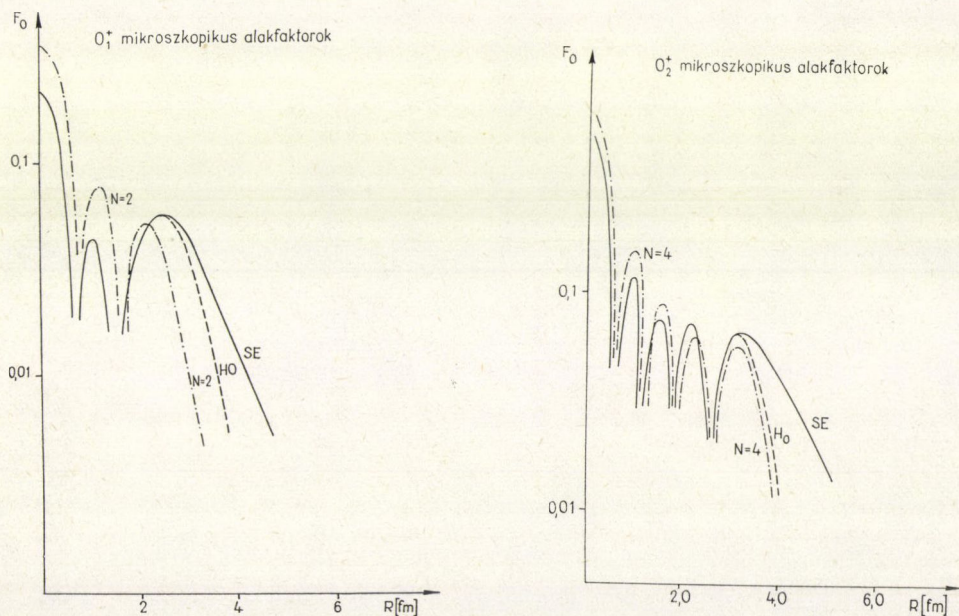
A (39) alatti mikroszkopikus DWBA amplitúdót úgy célszerű kiszámítani, hogy az integrálban szereplő alakfaktort előre számítjuk ki. Ily módon a torzított hullámokat csak egyszer kell meghatározni. A (25) és (39) alatti képletekben csak a szemléletesség kedvéért, a magszerkezetnek az egész reakcióamplitúdóra gyakorolt hatását hangsúlyozandó, emeltük ki az A_{NL} spektroszkópiai amplitúdókat a B_{NL} dinamikai amplitúdók elé. Így alkothattunk ugyanis magunknak képet arról, hogy az alakfaktort viszonylag csekély mértékben módosító magszerkezetnek milyen óriási befolyása van a reakció szögeloszlására.

Az előző fejezetben felsorolt feltevéseink következtében csupán az oxigénbeli α -részecske alakfaktort kell mikroszkopikusan meghatároznunk. A 2.4. fejezet végén mondottak értelmében ezt HO , ill. $HO + WS$ közelítésben fogjuk elvégezni, amely utóbbit az SE jellel fogunk ellátni. (Az SE jelölés utalás arra, hogy a helyes aszimptotikát a fenomenologikus alakfaktor számolásnál is használt módszerrel, a kísérleti szeparációs energiát (SE) biztosító ún. völgymélység eljárással kapjuk. Csakhogy amíg a fenomenologikus esetben az így kapott helyes aszimptotikájú függvény maga az alakfaktor, addig a jelen esetben az alakfaktor meghatározásánál a használt mikroszkopikus modellnek van döntő szerepe: az alakfaktor belső részét egyedül ez határozza meg, s a segítségül hívott völgymélység eljárást úgy kell [69] alkalmazni, hogy a vele kapott aszimptota simán illeszkedjék a mikroszkopikus görbe utolsó maximumához, és ugyanannyi nódussal rendelkezzen, mint a mikroszkopikus alakfaktor.)

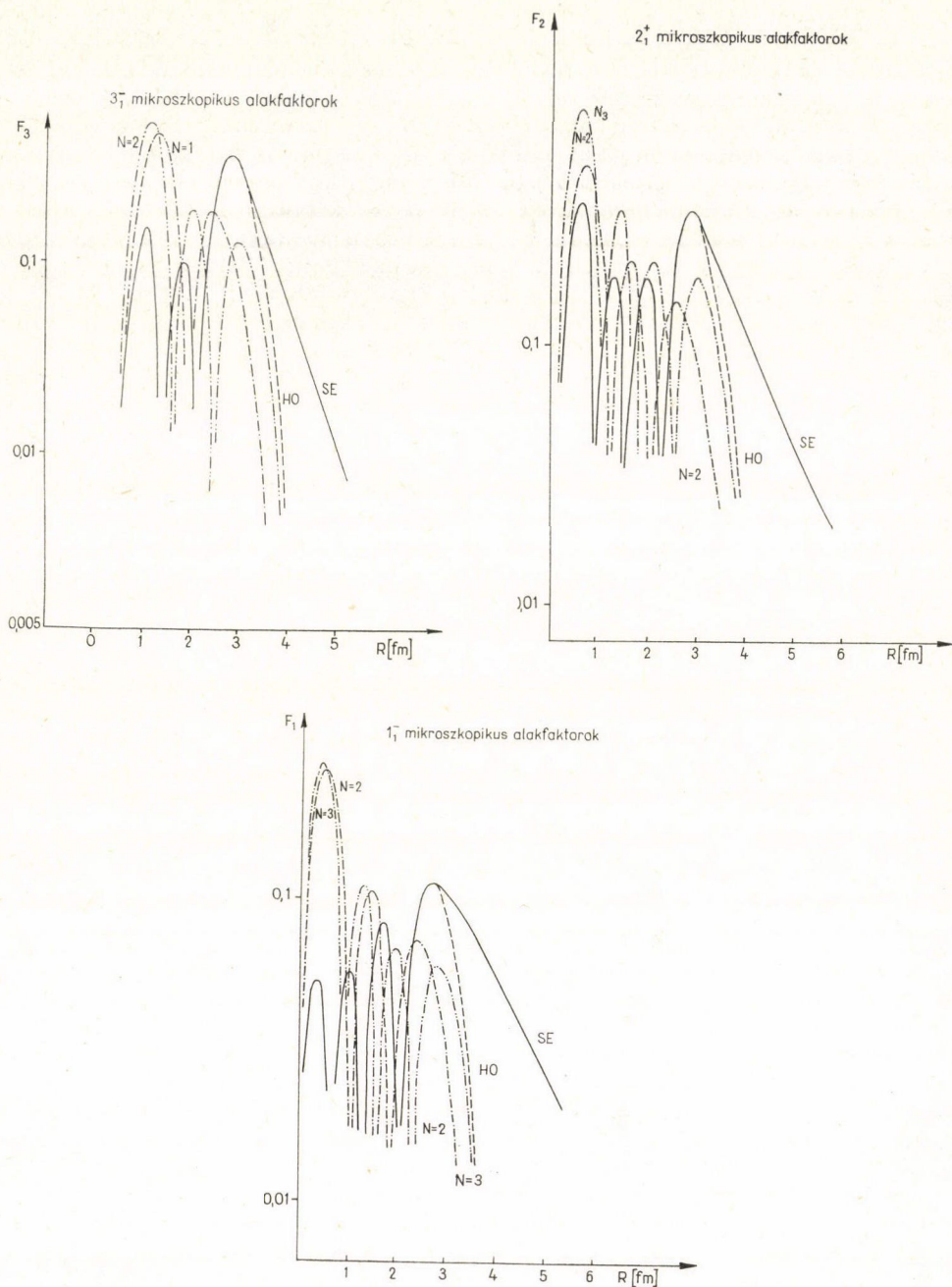
A 4. táblázatból az derül ki, hogy várhatóan csak a 0_2^+ állapotra vezető transzfer esetén elégedhetünk meg a fenomenologikus leírással (egy A_{NL} dominancia!), míg a többi, a 0_1^+ , 3_1^- , 2_1^+ , 1_1^- állapotokra vezető átmeneteknél a mikroszkopikus alakfaktorbeli koherens összegezésnek döntő befolyása lehet a hatáskeresztmetszetre. Azt már láttuk a 2. fejezetben, hogy a fenomenologikus eredmények a 0_2^+ -es esetben valóban (ld. 8/b ábrát) képesek a szögeloszlás némi reprodukciójára.

A mikroszkopikus alakfaktor számítását a (18a) alatti definíció alapján kell végrehajtani, gondosan ügyelve a felhasználandó, ill. az A_{NL} -ben már felhasznált φ_{NL} relatív hullámfüggvények fázisbeli azonosságára.

A 15/a, b, c, d, e ábrán láthatjuk a számolt mikroszkopikus alakfaktorokat. Jól észrevehető az ábrákon a (18a)-beli koherens összezés hatása: az egyes indi-



15. ábra



15/a-e ábrák. A (18a) egyenlettel definiált mikroszkopikus alakfaktorok a vizsgált öt J_i^π átmenetre vonatkozóan, a szövegben részletezett kétféle (HO, SE) közelítésben. Viszonyításképpen berajzoltunk néhány (N -nel jelölt) $A_{NL}\varphi_{NL}(R)$ részleges alakfaktort

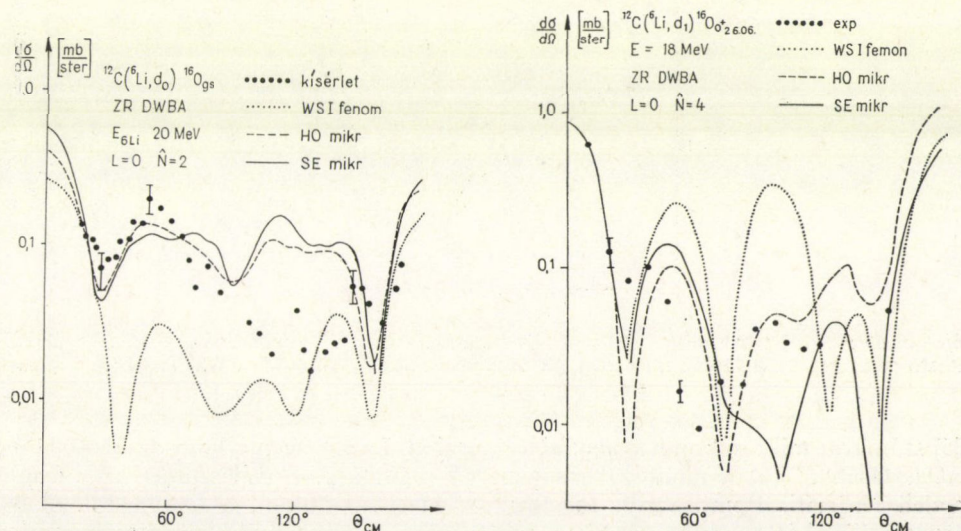
viduális domináns tagokhoz képest a teljes alakfaktor a *felülethez* közel megnő, míg belül viszont *lenyomódik*. (Ilyen effektust a kétnukleon transzfer reakciók esetére [27] is észlelt.) Ez azt jelenti, hogy a mikroszkopikus leírásmód kihangsúlyozza a felületet a mag belső részeivel szemben a reakció lefolyása szempontjából. Egyedül a 15/b ábrán nem látunk ilyen jelenséget. Ennek oka a 0_2^+ -es állapot szerkezetében rejlik: ez az állapot, mint a 3. fejezetbeli analízisben láttuk, majdnem tisztán 4-részecske—4-lyuk gerjesztésekből épül fel, ami viszont az $N=4$ nódus kvantumszámának felel meg. Legmarkánsabb felületkiemelkedést a 2^+ állapotra (15/d ábra), leglátványosabb belső-tartomány-nyomódást az 1^- állapotra (15/e ábra) láthatunk. Ez a felületkiemelkedés, ill. belső tartomány lenyomódás összhangban áll a ^{16}O atommagról alkotott azon elképzeléssel, hogy felületén α -clusterok találhatók.

A 15/a, b, c, d, e ábrákon a két különböző, SE és HO típusú aszimptotika egyre inkább eltér egymástól. Legkevésbé a 0_1^+ esetre, legjobban az 1^- esetre. Az eltérések oka az aszimptotikát megszabó α -kötési energiában keresendő, amely 0_1^+ esetén még $-7,16$ MeV, míg 1^- esetén már csak $-0,0423$ MeV (l. 2/b. táblázat).

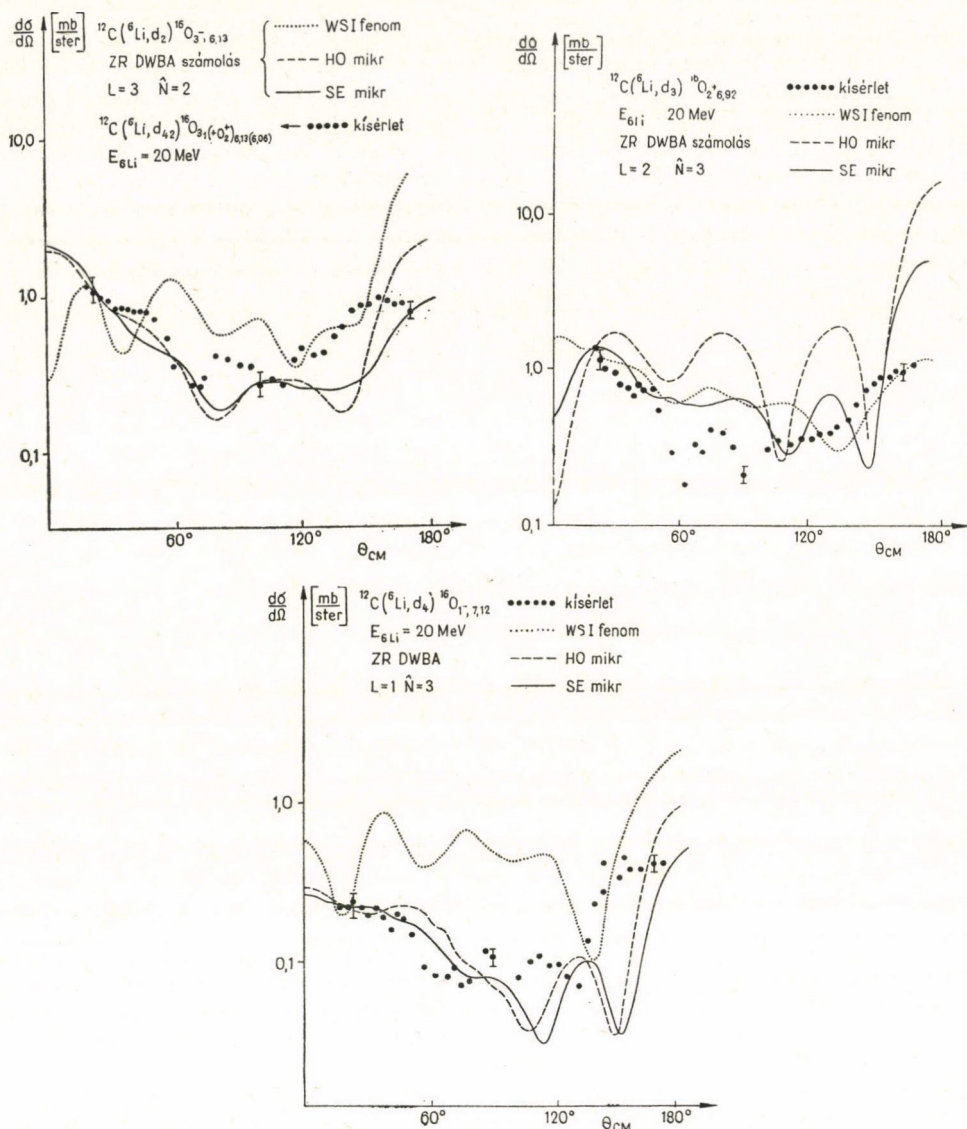
A 15/a—e ábrákon csak a domináns (egymással vetélkedő, ld. 4. táblázat) A_{NL} amplitúdóknak megfelelő „individuális” alakfaktorokat tüntettük fel a folyamatos vonallal jelölt „teljes” (mikroszkopikus) alakfaktor mellett. A következő fejezetben szögeloszlásokat határozzuk meg.

4.3. A szögeloszlások meghatározása

Az előző fejezetben meghatározott mikroszkopikus alakfaktorok segítségével elvégezhetjük a differenciális hatáskeresztmetszet számolást. Az eltérés a fenomenologikus esethez képest (ld. 2.3. fejezet) az, hogy már nincs szükségünk a különböző, fenomenologikus oxigénbeli α -részecske alakfaktorokra, szerepüket a ZBM-modellből



16. ábra



16/a—e ábrák. Mikroszkopikus differenciális hatáskeresztmetszet eredmények a 15/a—e ábrán látható alakfaktorok alkalmazása esetén. Viszonyításképpen feltüntetjük a WSI fenomenologikus eredményeket (pontosított görbe)

[36] számított mikroszkopikus alakfaktor veszi át. Ez azt jelenti, hogy az alakfaktor „választásában” többé nincs szabadságunk (N választása, r_0 választása), azt a magmodell lerögzíti. Pontosabban fogalmazva, megszabadulunk a fenomenologikus elméletbeli alakfaktor-választás bizonytalanságától, s így számolásunk négy paraméterrel (a három W/S paraméterrel és az $S_a(^{16}\text{O})$ spektroszkópiai faktorról) keve-

sebbet tartalmaz. (A megmaradt egyetlen paraméterrel, a könnyűrészcseke spektroszkópiai faktor $(S_\alpha(^6\text{Li})) \times \text{ZR}$ konstans (D_0^2) mennyiséggel később foglalkozunk.)

A vizsgált $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d_i)$ átmenetekre a mikroszkopikus módszerrel számolt differenciális hatáskeresztmetszetek a 16/a, b, c, d, e ábrán láthatók. A 8/a—e ábrákkal való könnyebb összevethetőség kedvéért berajzoltuk a 16. ábrába a megfelelő WSI fenomenologikus szögeloszlásokat. Összehasonlítás céljára azért választottuk az $N=(\hat{N})$, WSI típusú fenomenologikus számolást, mert az ezekhez tartozó alakfaktorok közelebb állnak a mikroszkopikus alakfaktorokhoz, mint a messze kinyúló WSII alakfaktorok. Egy ábrán belül tehát így szemléltethetjük legjobban a fenomenologikus és mikroszkopikus leírás közti különbséget.

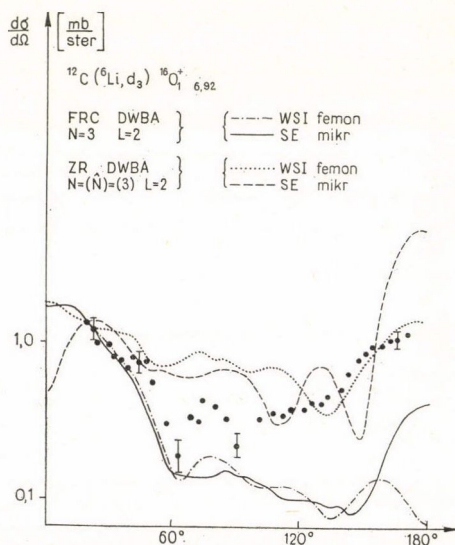
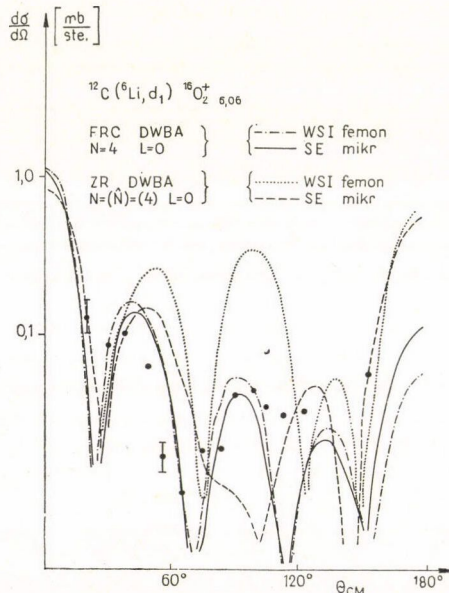
A 16/a—e ábrákat vizsgálva több megállapítást tehetünk:

1. A HO és SE szögeloszlások jellegben követik a kísérleti pontokat a teljes szögtartományban és erősen különböznek a berajzolt WSI fenomenologikus görbétől (jelleg alatt a görbe menetét, főbb jellegzetességét értjük, pl. a d_0, d_1, d_3 szögeloszlás eléggé oscillál, míg a d_2 és d_4 eloszlás 60°-ig meglehetősen sima lefutású).
2. A mikroszkopikus számolások 40—50°-ig (d_2, d_4 esetén ezen túl is) elég jól leírják a kísérleti szögeloszlások alakját, míg ez a fenomenologikus WSI számolásokról korántsem mondható el. (Itt meg kell jegyezni, hogy az irodalomban általában már sikernek könyvelik el, ha egy (fenomenologikus) α -transzfer számolás ezeket az előreszórás adatokat reprodukálja, ezért a szögeloszlásokat általában 50°–60°-ig közlik (l. pl. [21]). E mögött az a fizikai elképzelés húzódik, hogy egy direkt átadás jóval valószínűbb kis szórási szögeknél, mint nagy szögeknél [54, 5].)
3. 50°-on felüli szórási szögekre jelentősebb eltérések tapasztalhatók. Az eltérések két csoportra oszthatók: a) eltérések az elméleti és kísérleti értékek között; b) eltérések az elméleti számolások között. Érdemes megvizsgálni ezen eltérések eredetét!

a) a 2.3. fejezetbeli gondolatmenet alapján azt várnánk, hogy ha a kísérlettől való eltérések oka csupán a kompaund mechanizmus fellépte lenne, akkor az elméleti görbék alábecsülnék a kísérleti pontokat. Alulbecslés viszont csak két esetben, a d_2 és d_4 szögeloszlások esetén tapasztalható. Ezeknél az eloszlásoknál a kísérlet és elmélet közötti különbség egy, az egész szögtartományban végigvonul, kb. 30°-os fáziseltérésben jelentkezik: mindkét szögeloszlás görbe jól követi a kísérleti pontokat, viszont a kísérleti adatokban kb. 30°-onként mutatkozó enyhe oscillációkat az elméleti számolások éppen ellentétes fázissal adják vissza. Numerikus tapasztalat szerint viszont az ilyen enyhe fáziseltolódás az alakfaktor csekély mértékű módosításával kiküszöbölhető [69]. Kismértékű alakfaktor változás sokféleképpen elképzelhető, esetünkben pl. kismértékű ASA-változás révén, amely nem kizárt a csonkított héjmodell bázis, vagy az oszcillátorparaméterek csekély mértékű változtatósága miatt. Ez az oka annak, amiért az irodalomban általában nem tartják súlyosnak a kismértékű fáziseltolódást a kísérlet és elmélet között.

A többi esetben az elméleti számolások (d_1 esetén csak HO) felbecsülik az 50° feletti tartományban a kísérleti értékeket. Amennyiben elfogadjuk azt az eddigi összehasonlítások által is sugallt feltevést, hogy mikroszkopikus módszerünk helyesebben ad számot a vizsgált α -transzferekről, akkor ennek a ténynek a legvalószínűbb magyarázata az, hogy a használt ZR közelítés nem meg-

felelő. A fenomenologikus FR transzfer számolások is arra utalnak, hogy az ún. „FR hatások” (a (34) alatti 6 dimenziós integrálás teljes elvégzése) általában abban jelentkeznek, hogy a differenciális hatáskeresztmetszetet a hátraszórás tartományokban lenyomják a ZR számolásokkal kapotthoz képest. Ezt igazolják a FR korrekciós vizsgálatok. A FR hatásokat ugyanis meg lehet becsülni a Bencze és Zimányi által kifejlesztett ún. FR korrekciós (FRC) módszerrel [77]. Ennek lényege abban áll, hogy lokális energia közelítésben kiküszöböljük (10)-ből az egyik változó szerinti integrálást oly módon, hogy egy korrekciós függvényt ad meg, amellyel az alakfaktort kell megszorozni. Ez a korrekciós függvény tartalmazza az U_{aA} , U_{bB} optikai potenciálokat, valamint a V_{xB} kölcsönhatást, és az R_{FR} ún. FR-paramétert, amely a (30c) alatti D függvény Fourier-transzformáltjának elsőrendű momentuma. R_{FR} kiszámításához szükség van V_{xB} ismeretére. (${}^6\text{Li}, d$) reakcióra alkalmazva az eljárást, ha olyan V_{ad} WS potenciált veszünk alapul, amelyben a V_0 völgymélységet a $-1,47$ MeV $\alpha-d$ kötési energia biztosításával állítjuk be, az a_0 diffúzitást $0,65$ fm értéken fixen tartjuk, viszont az r_0 sugárparaméter-értéket $1,2-2,0$ fm között változtatjuk, akkor az R_{FR} paraméterre kapott értékek elég stabilan $1,5$ fm körül változnak [69]. $R_{FR}=1,5$ fm értéket alapul véve, FRC vizsgálataink a 17. ábrán látható eredményeket szolgáltatottak a d_1 és d_3 szögeloszlások esetén. (A többi esetre a nagy belső járulék (ld. b) pont) miatt nem alkalmazható a módszer). A 17/a, b ábrákra ránézve legelőször az tűnik fel, hogy bármennyire is eltért egymástól ZR esetben a mikroszkopikus és fenomenologikus szögeloszlás (d_1 -re legnagyobb volt az eltérés 90° tájékán, d_3 -ra pedig az előreszórásban), a FR hatás részleges figyelembe-



17/a, b. ábra. FR korrekciós DWBA számolás a 0_2^+ és 2_1^+ állapotra vezető α -transzfer reakció esetén. Viszonyításképpen feltüntetjük a ZR eredményeket is

vétele gyakorlatilag összehozza a kétféle típusú számolást. (Ez egyfajta bizonyítékot jelent arra nézve, hogy a d_1 , ill. d_3 szögeloszlások leírása szempontjából az alakfaktornak csak az aszimptotikus része fontos, ld. b) pont.) Látható az is, hogy a 0_2^+ állapotra vezető transzfer esetén $100-110^\circ$ -ig reprodukálódott a szögeloszlás, és a 90° -os szögek környékén igen nagymértékű javulást lehetett elérni. A 2^+ állapot gerjesztődése esetén a jellegzetes 60° körüli mély minimum irányába változott a FRC-val számolt szögeloszlás. Összegezve tehát: a FRC-os számolások a számított szögeloszlásokban kis szögekre alaki javulást, nagy szögekre jellegzetes csökkenő tendenciát eredményeztek, s így joggal várhatjuk, hogy a FR hatások egzakt figyelembevétele a d_0 , d_2 és d_4 mikroszkopikus szögeloszlásokra is javító hatással lesz.*

- b) A $16/a-e$ ábrákon jól látható, hogy a HO és SE görbék némely esetben eltérnek egymástól, más esetben az egész szórási tartományon át együtt változnak. Ilyen együtt változás figyelhető meg a d_0 , d_2 , d_4 -es szögeloszlásokra, a d_1 -es és d_3 -as szögeloszlásoknál viszont eléggé nagy eltérés tapasztalható a kétfajta mikroszkopikus leírás között. Ha meggondoljuk, hogy mi a különbség a két leírásmód között, akkor könnyen rájövünk a HO és SE számolások egyezésének, ill. különbözésének fizikai jelentésére. Ugyanis a két mikroszkopikus számolás mindössze az alakfaktorok *aszimptotikájában* tér el egymástól. Ez azt jelenti, hogy azokban az esetekben, ahol a DWBA amplitúdó a mag belső részeire érzékeny, ott a két elméleti szögeloszlás görbe hasonló lesz egymáshoz. Ahol viszont a két elméleti görbe között eltérés tapasztalható, ott éppen az alakfaktor aszimptotikus része (esetleges belső tartományokkal együtt) ad járulékot a differenciális hatáskeresztmetszethez.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a HO és SE görbék összehasonlítása révén információt szerezhetünk a reakcióleírás szempontjából lényeges tértartományról, ami egyben a reakció lezajlásának tértartománya is. Eszerint a 0_1^+ , 3_1^- , 1_1^- állapotok a transzferben résztvevő magok szorosabb együttlevése esetén jönnek létre, míg a 0_2^+ , 2_1^+ állapotok távoli magok között lezajló α -transzferrel népesülnek be.

A mikroszkopikus SE és a fenomenologikus WSI görbék közötti eltéréseket tanulmányozva ugyancsak arra a megállapításra juthatunk, hogy a belső járuléka a 0_1^+ , 3_1^- , 1_1^- állapotok benépesülésére vezető átmenetek esetén fontos (eltérő a görbék jellege, mivel az alakfaktorok belül különböznek), míg a 0_2^+ és 2_1^+ állapotokra vezető átmenetek esetén inkább a magtörzsön kívüli tartomány a lényeges (hasonló a szögeloszlások menete, mivel az alakfaktorok aszimptotikája is hasonló).

Elmondhatjuk tehát, hogy eredeti elképzelésünknek megfelelően a javasolt mikroszkopikus leírás képes arra, hogy egyöntetű módon adjon számot az összes vizsgált átmenet differenciális hatáskeresztmetszetének kb. $40^\circ-50^\circ$ -ig terjedő részéről. Más szóval, az ^{16}O mag Zuker-hullámfüggvényekkel történt mikroszkopikus figyelembevétele javulást hozott a vizsgált reakció átmeneteinek *alaki* leírásában, ugyanis a fenomenologikus leírás a d_1 és d_3 szögeloszlások kivételével még megközelítően sem volt képes az előreszórási szögeloszlások reprodukálására. A $\theta_{\text{CM}}=0^\circ-90^\circ$ szögtartományban elvégzett χ^2 számolás is ezt mutatja. A 7. táblázatban tüntettük

* A dolgozat befejezése óta megjelent egy közlemény [78], amely szintén ezt látszik igazolni.

fel a négyféle elméleti modellel kapott

$$\chi^2 = \frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{N_x} \left(\frac{d\sigma_{\text{exp}}(\theta_i) - n D_0^2 S_\alpha(^6\text{Li}) d\sigma_{\text{elm}}(\theta)}{\Delta d\sigma_{\text{exp}}(\theta_i)} \right)^2 \quad (58)$$

értékeket a vizsgált öt átmenetre. Jól látható, hogy a 0_1^+ , 3_1^- és 1_1^- állapotokra vezető transzfer esetén a mikroszkopikus (SE, HO) modell kisebb χ^2 értéket szolgáltat, mint a fenomenologikus (WSI, WSII) modell, míg a 0_2^+ és 2_1^+ állapotokra vezető transzfer esetén a χ^2 számolás nem tünteti ki egyik modellt sem. Az (58)-ban szereplő $n D_0^2 S_\alpha(^6\text{Li})$ értéket a 18. (összefoglaló) ábrán látható elméleti görbéknek a kísérleti pontokhoz való illesztésével lehet megkapni. Az illesztésre a legkisebb négyzetek módszerét használtuk. Az irodalomban a D_0^2 mennyiségre — (^6Li , d) reakció esetén — sokféle érték található ($10^4 - 3 \times 10^6$) MeV² fm³ tartományon belül. $S_\alpha(^6\text{Li})$ értékre ugyancsak sokféle érték ismeretes 0,3-tól 1,0-ig terjedő tartományban. Ezek a mennyiségek természetesen függetlenek a targetmagtól és a végmagállapottól, meghatározásuk egyértelmű, ahhoz egyedül a ^6Li mag szerkezetének ismeretére van szükség. A χ^2 számolásban $S_\alpha(^6\text{Li}) D_0^2 = 0,60 \times 10^4$ MeV² fm³ értéket látszott célszerűnek elfogadni (jó egyezésben [63]-mal), mivel ezzel a választással elérhető, hogy az (58)-ban szereplő n „illesztési paraméter” a mikroszkopikus számolásban nem csökken 1 alá. Az n illesztési paraméter kompenzálja a reakciószámolás által figyelembe nem vett mechanizmusokat és az összes egyéb közelítéseket (mindezeket a konvencionális fenomenologikus számolások a spektroszkópiai faktorba tömörítik). Az n illesztési faktor ezért reakciómodell és végállapot-

7. TÁBLÁZAT

Az (58) egyenlettel definiált χ^2 értékek a 18. ábrán látható görbékre vonatkozóan.

	SE	HO	WSI	WSII
0_1^+	2,96	1,36	6,55	5,58
0_2^+	52,0	25,9	135	25,7
3_1^-	1,02	1,18	7,09	7,20
2_1^+	4,08	7,03	4,91	5,51
1_1^-	1,07	2,17	4,79	4,24

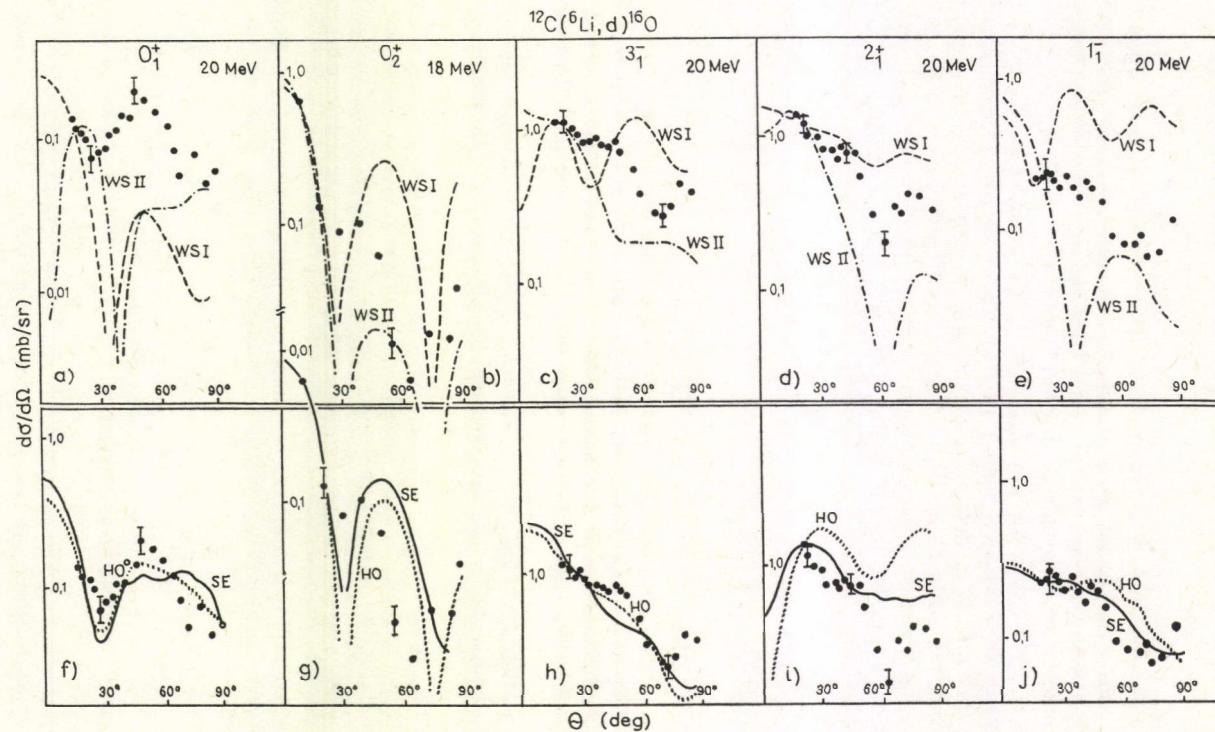
8. TÁBLÁZAT

Az (58) egyenletben szereplő n illesztési faktor értékei abban az esetben, ha a 18. ábrán látható elméleti görbék a legkisebb négyzetek módszerével illesztjük a kísérleti pontokhoz a $\theta_{\text{CM}} = 0^\circ - 90^\circ$ szögtartományban

	SE	HO	WSI	WSII	Hiba %
0_1^+	7,1	6,2	4,6	3,4	+16 -30
0_2^+	2,5	8,5	3,6	0,56	+20 -35
3_1^-	1,9	3,0	5,2	1,1	+16 -30
2_1^+	1,0	2,6	1,3	0,33	+16 -30
1_1^-	1,0	2,3	7,3	1,3	+16 -30

függő, értékeit a 8. táblázat tartalmazza. A feltüntetett hibák a kísérleti adatok hibájából, ill. az adatpontok ábráiból történő leolvasásának hibájából erednek. A 8. táblázat adataiból látható, hogy n értéke átlagban a 0_1^+ -re vezető átmenetre a legnagyobb, amiből arra következtethetünk, hogy más mechanizmusoknak ebben az átmenetben van legnagyobb szerepük.*

* A számítások befejezése óta napvilágot látott egy munka [78], amelyben a no-recoil közelítésben az alapállapotú átmenetre elvégzett mikroszkopikus számolás eredményeit egy 6-os faktorral kellett beszorozni, hogy nagyságrendi egyezést kapjanak a kísérleti értékekkel. (Vö. a 8. táblázat 7.1 értékével).



18. ábra Fenomenologikus (WSI, WSII) és mikroszkopikus (HO, SE) számolási eredmények hasonlítása a (pontozott) kísérleti értékekhez

Érdekes megfigyelni a 0_2^+ és 2_1^+ átmenetekre vonatkozó n értékek egymáshoz viszonyított szisztematikus változását, ami egyértelműen magyarázható az alakfaktor aszimptotikájának fontosságával. (Pl. a WSII esetre n azért kisebb jóval egyenél, mert a messze kinyúló WSII alakfaktorok aszimptotikái majorálják a többi modellnek megfelelő alakfaktor-aszimptotikákat.)

Összefoglalásképpen megállapítható tehát, hogy a magszerkezet hatása egyértelműen kimutatható a vizsgált reakció különféle átmeneteiben. A magszerkezet hatása az alakfaktoron keresztül érvényesül a leírásban. Annak oka, hogy az alakfaktornak a magszerkezet által leginkább befolyásolt belső része is járulékot ad a hatáskeresztmetszethez, a bemenő csatornabeli viszonylagos gyenge abszorpcióval magyarázható. Magasabb energián, ahol az abszorpció erősebb (a $^{12}\text{C}-^6\text{Li}$ potenciál imaginárius része nagyobb), a magszerkezetből eredő hatás valószínűleg elmosódik, s csak közvetve, az alakfaktor aszimptotikájának *nagyságát* befolyásolva jelentkezik [73].

5. Összefoglalás

Ez a dolgozat a transzfer reakciók mikroszkopikus leírása terén végzett elméleti vizsgálataimat tartalmazza.

A DWBA-közelítést alapul véve kimutatható, hogy a szórási amplitúdó x cluster transzfer esetén olyan amplitúdók szorzat-összegeként állítható elő, amelyben az amplitúdók kizárólag vagy magszerkezeti, vagy reakciódinamikai információt hordoznak (l. (25) egyenlet).

Megmutattam, hogy milyen feltételek teljesülése esetén van értelme x cluster transzferre a kísérleti spektroszkópiai faktor definícióinak. Ezen feltételek közelítő teljesülése a kísérletekből kivont spektroszkópiai faktorok bizonytalanságát vonja maga után (a spektroszkópiai faktorok értékét befolyásoló más tényezőket illetően l. [68]-at).

Alkalmazási példaként a $^{12}\text{C}(^6\text{Li}, d_i)^{16}\text{O}^*$ ($i=0-4$) α -transzfer reakciónak azt az öt átmenetét választottam, amelyben a ^{16}O atommag első öt (α -küszöb alatti) állapota népesül be. Kimutattam, hogy az irodalomban szokásos (meglehetősen flexibilis) fenomenologikus módszerrel ezek az átmenetek nem írhatók egyöntetű módon.

Feltételeztem, hogy a kísérleti eredmény és a fenomenologikus leírás közötti eltérés a magszerkezet figyelmen kívül hagyásából származik s ezért a számítások elvégzésére mikroszkopikus módszert alkalmaztam, amely a target és végmag mikroszkopikus szerkezetét bevonja a reakcióamplitúdó kiszámításába. A szerkezeti információt az x -cluster spektroszkópiai amplitúdó tartalmazza. Kimutattam, hogy a mikroszkopikus módszer alkalmazásával a fenomenologikus elmélet flexibilitása által okozott bizonytalanságok megszűnnek.

Levezettem a $^{16}\text{O}[J_i^\pi, T=0]$ $j-j$ csatolású héjmodell állapotaira vonatkozó α -spektroszkópiai amplitúdók számolására alkalmas formulát ((53) és Függelék). Sajátfejlesztésű számítógép programmal meghatároztam az α -spektroszkópiai amplitúdókat (ASA-kat) 24 oxigén állapotra (4.táblázat).

Kimutattam, hogy a kapott ASA-kból az (54a) definícióval meghatározott α -spektroszkópiai faktorinformációt tartalmaz az α -transzfer reakciókra vonatkozóan. Pl. számot ad bizonyos állapotsorozat erősebb, ill. gyengébb benépesíthetőségéről.

Megállapítottam, analizáltam és ábrázoltam (12. ábra) az ASA-k magszerke-

zeti információtartalmát. Tisztáztam a különböző radiális kvantumszámok fel-léptének fizikai okát.

Kimutattam és ábrázoltam (13. ábra) az ASA-k magmérettől való függését. Ábrázoltam (14. ábra) és vizsgáltam az ASA-k (héjmodell-, α -részecske-konfiguráció) átfedésből és héjmodell együtthatóiból összetevődő szerkezetét. Bemutattam, hogy ez a két összetevő egyenrangú szerepet játszik az ASA értékek kialakításában.

Mikroszkopikus módszert alkalmaztam a kiválasztott öt α -átmenet leírására. Első lépésben a mikroszkopikus alakfaktorokat határoztam meg (15. ábra). Megmutattam, hogy ezek tükrözik az ^{16}O α -cluster szerkezetét (4.2. fejezet). Második lépésként kiszámítottam a szögeloszlásokat. Ezek a szögeloszlások a fenomenologikus esethez viszonyítva jobb illeszkedést adtak a kísérleti eredményekhez. Ezt demonstrálta a 18. ábra és a 7. táblázat, amelyekből összefoglalóan megállapítható, hogy a mikroszkopikus leírás alkalmasabb a vizsgált α -transzfer reakció különböző átmenetei szögeloszlásának egyöntetű leírására [72, 73], mint az eddig alkalmazott fenomenologikus eljárás.

Végezetül nem szükségtelen hangsúlyozni azt, hogy az α -transzfer reakciók mikroszkopikus leírására tett kezdeti lépések (az eddigi biztató eredmények, és a mellékeredményekben rejlő további lehetőségek ellenére) további finomításra szorúlnak. Ezen a téren a legfontosabbaknak a következők látszanak:

- a) ZR helyett egzakt FR számolás alkalmazása;
- b) kompaud reakció számolással való kiegészítés;
- c) az antiszimmetrizációból eredő kicserélődési hatás figyelembevétele;
- d) csatolt csatornás reakció számolással való kiegészítés.

Ezen finomítások folyamatban vannak [64].

6. Függelék

Az a_{NL} speciális α -spektroszkópai amplitúdó (SASA) redukálása programozható alakra

Az (53), (34) és (38) egyenletek felhasználásával a SASA definíciója

$$a_{NL}(k_1 t_1, k_2 t_2; JT = 0) = \int d\xi_\alpha d\mathbf{q}_\alpha \psi_\alpha^*(\xi_\alpha) \varphi_{NLM}^*(\mathbf{q}_\alpha; v_0) \psi_4(k_1 t_1, k_2 t_2; JT = 0; \zeta_\alpha) \quad (\text{A1})$$

Foglalkozzunk először ψ_4 -gyel. A (39)-es definícióból elindulva az izospin rész érintetlenül hagyásával szétcsatoljuk a két ((12) és (34)) nukleonpárt, majd ezeket külön-külön a jj csatolási sémából az LS csatolási sémába írjuk át [3] felhasználásával. Így a spin-izospin rész külön kezelhető. Eredményül a következő alakot nyerjük:

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &\equiv |(12)k_1(34)k_2\rangle^{JM} |(12)t_1(34)t_2\rangle^{00} = \\ &= \sum_{m_1 m_2} C(k_1 m_1 k_2 m_2 | JM) f_1 f_2 f_3 f_4 \times \\ &\quad \times \sum_{\lambda_1 \lambda_2 s_1 s_2} \hat{\lambda}_1 \hat{\lambda}_2 \hat{s}_1 \hat{s}_2 \left\{ \begin{matrix} l_1 l_2 \lambda_1 \\ \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_1 \\ j_1 j_2 k_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 l_4 \lambda_2 \\ \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_2 \\ j_3 j_4 k_2 \end{matrix} \right\} \times \\ &\quad \times \sum_{\mu_1 \mu_2 M_{s_1} M_{s_2}} C(\lambda_1 \mu_1 S_1 M_{s_1} | k_1 m_1) C(\lambda_2 \mu_2 S_2 M_{s_2} | k_2 m_2) \times \\ &\quad \times |l_1 l_2; \lambda_1 \mu_1\rangle |l_3 l_4; \lambda_2 \mu_2\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2} S_1 M_{s_1}\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2} S_2 M_{s_2}\rangle |(12)t_1(34)t_2\rangle^{00} \end{aligned}$$

ahol $C(|\rangle)$ a Clebsch—Gordan együtthatókat, a $\{\vdots\vdots\}$ szimbólum a $9-j$ átcsatolási együtthatókat jelenti, és a $j \equiv (2j+1)^{1/2}$ rövidítést alkalmaztuk.

Most már elvégezhető az (A1)-beli spin és izospin koordináták szerinti integrálás (36c), (52c) és (A2) felhasználásával. Az (52c) három sorának megfelelően három tagot kapunk:

$$\begin{aligned}
 I_{st} &\equiv \int \prod_{i=1}^4 d\sigma_i d\tau_i \chi_{\alpha st}^* (\xi \sigma_i \tau_i), \quad i = 1, \dots, 4) \times \\
 &\times |\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} S_1 M_{s_1} \rangle | \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} S_2 M_{s_2} \rangle | (12) t_1 (34) t_2 \rangle^{00} = \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{12}{\sqrt{3}} \delta_{s_1 0} \delta_{M_{s_1} 0} \delta_{s_2 0} \delta_{M_{s_2} 0} \delta_{t_1 1} \delta_{t_2 2} + \\
 &+ \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{(-1)^{s_2 + M_{s_2}}}{2} \delta_{s_1 s_2} \delta_{M_{s_1} - M_{s_2}} \delta_{t_1 t_2} \left(\delta_{t_1 0} - \frac{\delta_{t_1 1}}{\sqrt{3}} \right) - \\
 &- \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{(-1)^{M_{s_2}}}{2} \delta_{s_1 s_2} \delta_{M_{s_1} - M_{s_2}} \delta_{t_1 t_2} \left(\delta_{t_1 0} + \frac{\delta_{t_1 1}}{\sqrt{3}} \right),
 \end{aligned} \tag{A3a}$$

ahol többször felhasználtuk a következő összefüggéseket (l. pl. [3] vagy [42]):

$$\begin{aligned}
 \int d\sigma Y_{\frac{1}{2}}^{s*}(\sigma) Y_{\frac{1}{2}}^{s'}(\sigma) &= \delta_{ss'} \\
 C(jmjm'|00) &= \frac{(-1)^{j-m}}{j} \delta_{m, -m'} \\
 C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3) &= (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 - 2m_3} C(j_1 - m_1 j_2 - m_2 | j_3 - m_3) \\
 C(\tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2} | 1 - 1) &= C(\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} | 11) = 1 \\
 C(\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2} | t0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \text{ha } t = 0, 1
 \end{aligned}$$

(A3a)-ban a három tag összevonható az

$$I_{st} = \frac{(-1)^{M_{s_2} + 1}}{\sqrt{6}} \delta_{s_1 s_2} \delta_{M_{s_1} - M_{s_2}} \delta_{t_1 t_2} (\delta_{s_2 1} \delta_{t_1 0} + \sqrt{3} \delta_{s_2 0} \delta_{t_1 1}) \tag{A3b}$$

tömörebb alakba [30].

(A3b) és (A2) felhasználásával és az S_1, M_{S_1} szerinti összegezéseket elvégezve, valamint az $S_2 \equiv S, M_{S_2} \equiv M_S$ jelöléseket bevezetve a SASA a következő alakú

pillanatnyilag [30]:

$$a_{NL}(k_1 t_1, k_2 t_2; J) = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{m_1 m_2} C(k_1 m_1 k_2 m_2 | JM)$$

$$j_1 j_2 j_3 j_4 \sum_{s \lambda_1 \lambda_2} \hat{\lambda}_1 \hat{\lambda}_2 S^2 \left\{ \begin{matrix} l_1 l_2 \lambda_1 \\ \frac{1}{2} \frac{1}{2} S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 l_4 \lambda_2 \\ \frac{1}{2} \frac{1}{2} S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 j_2 k_1 \\ j_3 j_4 k_2 \end{matrix} \right\} \quad (A4)$$

$$\delta_{t_1 t_2} (\delta_{s1} \delta_{t_{10}} + \sqrt{3} \delta_{s0} \delta_{t_{11}}) \sum_{M_s \mu_1 \mu_2} (-1)^{M_s} C(\lambda_1 \mu_1 S - M_s | k_1 m_1)$$

$$C(\lambda_2 \mu_2 S M_s | k_2 m_2) I_{NLM}(\{v_i l_i; \lambda_n \mu_n\}, i = 1 \dots 4, n = 1, 2),$$

ahol a térkoordináták szerinti integrálokat

$$I_{NLM}(\{v_i l_i; \lambda_n \mu_n\}; i = 1, \dots, 4; n = 1, 2) \equiv$$

$$\equiv \int \prod_{i=1}^4 d\varrho_i \Phi_{\alpha}^{\text{orb}*}(\varrho_1 \varrho_2 \varrho_3; v_{0\alpha}) \varphi_{NLM}^*(\varrho_4, v_0) \times$$

$$\times |v_1 l_1 v_2 l_2; \lambda_1 \mu_1\rangle |v_3 l_3 v_4 l_4; \lambda_2 \mu_2\rangle \quad (A5)$$

tartalmazza.

A számolás továbbvitele érdekében specifikálnunk kell az (A5)-beli $|\rangle$ két-részecske ketet; legyen

$$|v_1 l_1 v_2 l_2; \lambda_1 \mu_1\rangle \equiv [\varphi_{v_1 l_1}(\mathbf{r}_1; v_0) \varphi_{v_2 l_2}(\mathbf{r}_2; v_0)]^{\lambda_1 \mu_1}, \quad (A6)$$

azaz, reprezentáljuk a ZBM héjmodell $v_i l_i$ egyrészecske függvényeit v_0 paraméterű HO hullámfüggvényekkel! ((A6)-ben a $[\]^{\text{lm}}$ jel az összecsatoltságra utal.) Az (A6) alatti választást a 2.5 alfejezetben mondottak indokolják fizikailag.

A ψ_4 héjmodell hullámfüggvény a ζ_{α} individuális koordinátarendszerben van megadva, ezért azt először át kell transzformálni a ξ_{α} belső és ϱ_4 tömegközépponti rendszerbe, hogy az (A5) alatti integrálás elvégezhető legyen. (Fordítva, tehát a $\Phi_{\alpha}^{\text{orb}}(\xi_{\alpha}; v_{0\alpha}) \varphi_{NL}(\varrho_4, v_0)$ függvények ζ_{α} rendszerbe való transzformációja nem kivitelezhető az α -részecske szabad ($v_{0\alpha}$) és a ^{16}O magbéli (v_0) méreteinek különbözősége, azaz $v_0 \neq v_{0\alpha}$ miatt; a 3.3. fejezetben éppen az α -részecske méretének az ASA-ra gyakorolt hatását is vizsgálni akarjuk.) Ezt a transzformációt oszcillátorfüggvények esetén a jól kidolgozott Talmi—Moshinsky-technika szerint [43] analitikusan végezhetjük el és eredményül a

$$[\varphi_{v_1 l_1}(\mathbf{r}_1; v_0) \varphi_{v_2 l_2}(\mathbf{r}_2; v_0)]^{\lambda_1 \mu_1} [\varphi_{v_3 l_3}(\mathbf{r}_3; v_0) \varphi_{v_4 l_4}(\mathbf{r}_4; v_0)]^{\lambda_2 \mu_2} =$$

$$= \sum_{\substack{n_1 n_2 \lambda_1 \lambda_2 \\ N_1 N_2}} \langle n_1 0(\varrho_1) N_1 \lambda_1(\mathbf{R}_{12}) \lambda_1 | v_1 l_1(\mathbf{r}_1) v_2 l_2(\mathbf{r}_2) \lambda_1 \rangle_{BM} \times$$

$$\times \langle n_2 0(\varrho_2) N_2 \lambda_2(\mathbf{R}_{34}) \lambda_2 | v_3 l_3(\mathbf{r}_3) v_4 l_4(\mathbf{r}_4) \lambda_2 \rangle_{BM} \times \quad (A7)$$

$$\times \sum_{n_3 N_3 \lambda_{\mu}} C(\lambda_{1\mu_1} \lambda_{2\mu_2} | \lambda_{\mu}) \langle n_3 0(\varrho_3) N_3 \lambda(\varrho_4) \lambda | N_1 \lambda_1(\mathbf{R}_{12}) N_2 \lambda_2(\mathbf{R}_{44}) \lambda \rangle_{BM} \times$$

$$\times \prod_{i=1}^3 \varphi_{4i 00}(\varrho_i; v_0) \varphi_{N_3 \lambda_{\mu}}(\varrho_n; v_0) + \text{további tagok kifejezést nyerjük, ahol a } \langle \lambda | \lambda \rangle_{BM}$$

Talmi—Moshinsky transzformációs együttható [43] a $q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ relatív és $\mathbf{R}_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1)$ tömegközépponti koordinátarendszerbe transzformálja át az $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ -beli λ teljes impulzuszómomentumú kétrészecske *HO* hullámfüggvényt, azaz

$$[\varphi_{v_1 l_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{v_2 l_2}(\mathbf{r}_2)]^{\lambda \mu} = \sum_{n_1 N_1 \lambda_1 A_1} \langle n_1 \lambda_1(q_1) N_1 A_1(\mathbf{R}_{12}) \lambda | v_1 l_1(\mathbf{r}_1) v_2 l_2(\mathbf{r}_2) \lambda \rangle_{BM} \times \\ \times [\varphi_{n_1 \lambda_1}(q_1) \varphi_{N_1 A_1}(\mathbf{R}_{12})]^{\lambda \mu} \quad (\text{A8})$$

érvényes a

$$2(v_1 + v_2) + l_1 + l_2 = 2(n_1 + N_1) + \lambda_1 + A_1 \quad (\text{A9a})$$

oszcillátorenergia megmaradást kifejező egyenlet mellett.

Természetesen a

$$\Delta(\lambda_1 A_1 \lambda); \quad \Delta(l_1 l_2 \lambda) \quad (\text{A9b})$$

háromszög-egyenlőtlenségnek és a

$$(-1)^{\lambda_1 + A_1} = (-1)^{l_1 + l_2} \quad (\text{A9c})$$

paritás megmaradásnak is teljesülnie kell (A8)-ban. A szemléletesség kedvéért a 10. ábrán feltüntettük az (A7)-beli transzformációk sorrendjének menetét. (A9) alapján (A7)-ben az összegezésnek korlátot szabnak a következő kiválasztási szabályok:

$$2(v_1 + v_2) + l_1 + l_2 = 2(n_1 + N_1) + \lambda_1$$

$$2(v_3 + v_4) + l_3 + l_4 = 2(n_2 + N_2) + \lambda_2$$

$$2(N_1 + N_2) + \lambda_1 + \lambda_2 = 2(n_3 + N_3) \neq \lambda. \quad (\text{A10a})$$

$$\Delta(l_1 l_2 \lambda_1), \quad \Delta(l_3 l_4 \lambda_2), \quad \Delta(\lambda_1 \lambda_2 \lambda). \quad (\text{A10b})$$

$$(-1)^{l_1 + l_2} = (-1)^{\lambda_1}, \quad (-1)^{l_3 + l_4} = (-1)^{\lambda_2}, \quad (-1)^{\lambda_1 + \lambda_2} = (-1)^{\lambda}. \quad (\text{A10c})$$

Ahogy (A7)-ben is jeleztük, a kifejtés nem korlátozódik csupán a relatív *s* állapotokra, hanem további tagok is vannak. Azonban könnyen belátható (A6) felhasználásával és az (A7) alatti eredményt (A5)-be visszaírva, hogy a gömbfüggvények ortogonalitása miatt az (A7)-beli „további tagok” zérust adnak az integrálhoz. (52b) és (A6) felhasználásával, valamint az (A7)-es kifejezés (A5)-be való helyettesítésével az

$$I_n(v_{0z}, v_0) = \int \varphi_{000}^*(\mathbf{r}; v_{0z}) \varphi_{n00}(\mathbf{r}; v_0) d\mathbf{r} \quad (\text{A11})$$

típusú integrálokra jutunk. A q_4 -től függő tömegközépponti *HO* hullámfüggvények integrálása az azonos paraméterű *HO* függvények ortonormáltsága miatt:

$$\int \varphi_{NLM}^*(q_4; v_0) \varphi_{N_3 \lambda_3 \mu}(q_4; v_0) dq_4 = \delta_{N_3 N} \delta_{\lambda \lambda} \delta_{\mu \mu}. \quad (\text{A12})$$

(A11) kiértékeléséhez felhasználjuk (51b) és (51c) egyenletet:

$$I_n(v_{0\alpha}, v_0) = \frac{4(v_{0\alpha} v_0)^{3/4}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{n!(2n+1)!!}{2^n} \right)^{1/2} \sum_{k=0}^n (-2)^k \frac{v_0^k}{k!(n-k)!(2k+1)!!} \times \\ \times \int_0^\infty dr r^{2(k+1)} e^{-\frac{1}{2}(v+v_0)r^2}, \quad (\text{A13})$$

ahol a megmaradt végső radiális integrál a

$$\int_0^\infty dx x^{k+\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(v+v_0)x} = \left(\frac{2}{v_{0\alpha}+v_0} \right)^{k+\frac{3}{2}} \Gamma\left(k+\frac{3}{2}\right) \quad (\text{A14})$$

összefüggés [44] segítségével számolható ki. Ezt felhasználva:

$$I_n(v_{0\alpha}, v_0) = \left(\frac{2\sqrt{v_{0\alpha} v_0}}{v_{0\alpha}+v_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} \left(\frac{(n+\frac{1}{2})!}{n!} \right)^{1/2} \left(\frac{v_{0\alpha}-v_0}{v_{0\alpha}+v_0} \right)^n. \quad (\text{A15a})$$

Azonnal felismerjük, hogy ez az integrál csak a $v_0/v_{0\alpha}$ viszonyától függ, ugyanis

$$I_n(v_{0\alpha}, v_0) = I'_n\left(\frac{v_0}{v_{0\alpha}}\right) = \left(\frac{2\sqrt{\frac{v_0}{v_{0\alpha}}}}{1+\frac{v_0}{v_{0\alpha}}} \right)^{3/2} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left(\frac{(n+\frac{1}{2})!}{n!} \right)^{1/2} \left(\frac{1+\frac{v_0}{v_{0\alpha}}}{1+\frac{v_0}{v_{0\alpha}}} \right)^n \quad (\text{A15b})$$

(A6) felhasználásával (A8)-nak (A5)-be való helyettesítésével, valamint (A15b) és (A12) figyelembevételével (A4) programozható alakját kapnánk. Azonban az így kapott összefüggésben még öt mágneses kvantumszámra vonatkozó összegzés is szerepel, ami a számítást nagyon időigényessé tenné. Ennek elkerülése végett felhasználjuk a

$$\sum_{\substack{\mu_1 \mu_2 \\ m_1 m_2 \\ M_s}} C(k_1 m_1 k_2 m_2 | JM) C(\lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2 | LM) (-1)^{M_s} \times \\ \times C(\lambda_1 \mu_1 S - M_s | k_1 m_1) C(\lambda_2 \mu_2 S M_s | k_2 m_2) = \delta_{LJ} 5 \hat{k}_1 \hat{k}_2 (-1)^{-\lambda_1 - k_2 - L} \begin{Bmatrix} \lambda_1 S k_1 \\ k_2 J \lambda_2 \end{Bmatrix} \quad (\text{A16})$$

összefüggést, amely éppen az említett összegezéstől mentesít bennünket, ezen kívül a négy Clebsch—Gordan-együtthatót sem kell külön-külön kiszámolni. Az (A16) jobb oldalán álló $\{:::\}$ szimbólum a Racah-féle $6-j$ együttható [42].

Ezt felhasználva kapjuk a végső formulát az (A1) alatt definiált SASA-ra [30]:

$$\begin{aligned}
 a_{NL}(k_1 t_1, k_2 t_2, J0) = & \delta_{LJ} \delta_{t_1 t_2} \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{2 \sqrt{\frac{v_0}{v_{0\alpha}}}}{1 + \frac{v_0}{v_{0\alpha}}} \right)^{9/2} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right)^{3/2} \times \\
 & \times j_1 j_2 j_3 j_4 k_1 k_2 \hat{L}^2 \sum_{S \lambda_1 \lambda_2} \hat{\lambda}_1 \hat{\lambda}_2 \hat{S}^2 (-1)^{\lambda_1 + \lambda_2 + L} \times \\
 & \times (\delta_{s_1} \delta_{t_1 0} + \sqrt{3} \delta_{s_0} \delta_{t_1 1}) \left\{ \begin{matrix} k_1 \lambda_1 S \\ \lambda_2 k_2 L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 l_2 \lambda_1 \\ \frac{1}{2} \frac{1}{2} S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 l_4 \lambda_2 \\ j_3 j_4 k_2 \end{matrix} \right\} \times \\
 & \times \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ \lambda_1 \lambda_2}} \langle v_1 l_1(\mathbf{r}_1) v_2 l_2(\mathbf{r}_2) \lambda_1 | n_1 0(q_1) N_1 \lambda_1(\mathbf{R}_{12}) \lambda_1 \rangle_{BM} \times \\
 & \times \langle v_3 l_3(\mathbf{r}_3) v_4 l_4(\mathbf{r}_4) \lambda_2 | n_2 0(q_2) N_2 \lambda_2(\mathbf{R}_{34}) \lambda_2 \rangle_{BM} \times \\
 & \times \langle N_1 \lambda_1(\mathbf{R}_{12}) N_2 \lambda_2(\mathbf{R}_{34}) L | n_3 0(q_3) NL(q_4) L \rangle_{BM} \times \\
 & \times \prod_{i=1}^3 \left(\frac{(n_i + \frac{1}{2})!}{n_i!} \right)^{1/2} \left(\frac{1 - \frac{v_0}{v_{0\alpha}}}{1 + \frac{v_0}{v_{0\alpha}}} \right)^{n_i},
 \end{aligned} \tag{A17}$$

ahol az összegezésnek korlátot szabnak az (A10) alatt felírt kiválasztási szabályok $N_3=N$, $\lambda=L$ helyettesítéssel. Az (A17) alatti kifejezés (53) felhasználásával azokat a ^{16}O (J_i^π , $T=0$) állapotainak megfelelő ASA-kat szolgáltatja programozható formában, amelyekre a (39) egyenletben szükség van.

A megfelelő sajátfejlesztésű Fortran-program több mint 1200 kártyából áll és a CDC—3300 típusú számítógépen 75 core-t* foglal le. A 2_i^+ állapotok spektroszkópiai amplitúdóit ~ 5 perc kváziidő alatt számolja ki.

IRODALOM

1. *W. Tobocman*, Theory of Direct Nuclear Reactions Oxford University Press, 1961.
2. *K. Bethge*, Annual Review of Nucl. Sci. 20, 255, 1970 és a benne levő 194 irodalmi idézet, amely magába foglalja az 1970-ig végzett összes α -transzfer kísérletet. Más transzfer reakciókra nézve l. pl. a tokiói konferencia anyagát, amely megjelent a J. Phys. Soc. Japan 44-es kötetének külön-számaként.
3. *A. de-Shalit és I. Talmi*, Nuclear Shell Theory Academic Press, New York and London, 1963.
4. *F. Ajzenberg—Selove*, Nucl. Phys. A166 1, 1971.
5. *Németh J.*, Atommagok és elemi részek, kézirat, Tankönyvkiadó, 1974.
6. *Erő J. és társai*, megjelenőben.
7. *Y. A. Kuderyarov és társai*, Nucl. Phys. A163 316, 1971.
8. *A. Arima és S. Yoshida*, Nucl. Phys. A219, 475, 1974.
9. *M. Gell-Mann és M. L. Goldberger*, Phys. Rev. 91, 398, 1952.
10. *Marx Gy.*, Kvantummechanika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1971.
11. *A. Arima és társai*, Nucl. Phys. A215, 109, 1973.

* 1 core=0,5 K szó.

12. L. A. Charlton, Phys. Rev. C8, 146, 1973.
13. P. D. Kunz, DWUCK-kód és leírás, 1969 Univ of Colorado C00-535-606, nem publikált.
14. P. Nagel és R. D. Koshel, Phys. Rev. C13, 907, 1976, C14, 1667, 1976.
K. I. Kubo és M. Hirata, Nucl. Phys. A187 186, 1972.
15. R. Bock és H. Yoshida, Nucl. Phys. A189, 177, 1972.
16. W. R. Phillips, Reports on Progr. in Phys. 40, 345, 1977.
17. L. [54] 305. oldal.
18. K. Meier—Ewert és társai, Nucl. Phys. A110, 142, 1968.
19. F. Ajzenberg—Selove, Nucl. Phys. A190, 1, 1972.
20. K. Bethge, Heidelbergi konferencia anyagában, Nuclear Reaction Induced by Heavy Ions. North-Holland Publ. Comp. — Amsterdam, 1970. Kiadta: R. Bock és W. R. Herring, 277. oldal.
21. U. Strohbusch és társai, Phys. Rev. C9, 965, 1974.
H. W. Fulbright és társai, Physics Letters 53B, 449, 1975.
22. K. Bethge, Z. Physik 208, 486, 1968.
23. E. Newmann és társai, Nucl. Phys. A100, 225, 1967.
24. K. T. Hecht és D. Braunschweig, Nucl. Phys. A244, 365, 1975, valamint I. [31].
25. Handbook of Mathematical Functions (kiadta: M. Abramowitz és I. A. Stegun, Dover Publications, Inc. New York.
26. H. J. Mang, Z. Physik 148, 582, 1957.
27. N. K. Glendenning, Phys. Rev. 137, B102, 1965.
28. P. J. A. Buttle és L. J. B. Goldfarb, Nucl. Phys. 78, 409, 1966.
29. L. [31]-beli diszkussziót.
30. Apagyi B. és társai, Nucl. Phys. A272, 303, 1976.
31. M. Ichimura és társai, Nucl. Phys. A204, 225, 1973.
32. A. P. Zuker és társai, Phys. Rev. Letter 21, 39, 1968.
33. M.-C. Lemaire, Physics Letters 7C, 281, 1973.
G. J. Wagner és társai, Phys. Rev. C16, 1271, 1977.
A. A. Pilt és H. T. Fortune, J. Phys. G4, L77, 1978.
34. T. T. S. Kuo és G. E. Brown, Nucl. Phys. 85, 40, 1966.
35. J. M. Irvine, Nuclear Structure theory, Pergamon Press, Oxford, New York, Toronto. Sydney, Braunschweig 1972.
36. A. P. Zuker és társai, Informal report, PD—99 BNL 14085, 1969.
37. Fái Gy., Magyar Fizikai Folyóirat 23, 393, 1975.
38. Apagyi B., J. Phys. G4, 1859, 1978.
39. J. B. French és társai, Advances in Nucl. Phys. 3, 193, 1969.
40. Bencze Gy. és társai, Lett. Nuovo Cim. 20, 248, 1977.
41. Németh Judit személyes közlése.
42. D. M. Brink és G. R. Satchler, Angular Momentum Oxford University Press, 1962.
43. T. A. Brody és M. Moshinsky, Tables of Transformation Brackets, Gordon and Breach, New York, 1967.
44. I. Sz. Gradstein és I. M. Rizsik, Integráltáblázat. Nauka kiadó, Moszkva, 1971.
45. J. P. Draayer, Nucl. Phys. A237, 157, 1975.
46. A. Bohr és B. R. Mottelson, Nuclear Structure Vol. I. W. A. Benjamin, Inc., 1969, New York, Amsterdam.
47. L. 20, 278. oldal.
48. Apagyi B. és Fái Gy., J. Phys. G3, L163, 1977.
49. L. 20, 282. oldal.
50. L. 20, 280. oldal.
51. L. 20, J. R. Comfort és társai, 305. oldal.
52. L. 18. vagy 6. ábra.
53. T. P. Marvin és P. P. Singh, Nucl. Phys. A180, 282, 1972.
54. P. E. Hodgson, Nuclear Reactions and Nuclear Structure, Clarendon Press, Oxford, 1971.
55. Apagyi B. és Vertse T., Proc. Conf. on Reaction Models '77 Balatonfüred, Kiadó: Csernai L.
56. N. S. Chant és társai, Phys. Rev. C17, 8, 1978.
57. D. F. Jackson, J. Phys. G4, 1287, 1978.
58. Apagyi B., Periodica Polytechnica, 21, 161, 1977.
59. F. A. Garaev személyes közlése.
60. N. Austern, Direct Nuclear Reaction Theories, Wiley-Interscience, 1970.
61. F. Ajzenberg—Selove és T. Lauritsen, Nucl. Phys. A227, 1, 1974.
62. G. R. Plattner és társai, Physics Letters 61B, 21, 1976.

63. *M. P. Bournand és társai*, Nucl. Phys. *A294*, 492, 1978.
64. *Apagyi B.* előkészületben.
65. *P. J. Buttle és L. Goldfarb*, Proc. Phys. Soc. *83*, 701, 1964.
66. *K. T. Hecht*, Phys. Rev. *C16*, 2401, 1977.
67. *L.* [54], 501. o.
68. *Vertse Tamás*, kandidátusi értekezés, 1978.
69. *Vertse Tamás* személyes közlése.
70. *C. H. Johnson*, Phys. Rev. *C2*, 41, 1970.
71. *A. Cunsolo és társai*, Phys. Rev. *C18*, 856, 1978.
72. *Apagyi B. és Vertse T.*, megjelent a gaussigi nemzetközi konferencia (Selected topics on nuclear reaction mechanism, Gaussig, 1978 November) anyagában, zfk-382.
73. *Apagyi B. és Vertse T.*, Phys. Rev. *C21*, 779, 1980.
74. *D. P. Balamuth*, Phys. Rev. *C8*, 1185, 1973.
75. *Borbély Imre*, Nucl. Phys. *A262*, 244, 1976.
76. *K. Bethge és társai*, Phys. Rev. *C2*, 395, 1970.
77. *Bencze Gy. és Zimányi J.*, Phys. Letters *9*, 246, 1964.
78. *M. Makowska—Reszutko és társai*, Physics Letters, *74B*, 187, 1978.
79. *Fulbright H. W.*, Ann. Rev. of Nucl. Part. Sci. *29*, 161, 1979.

Köszönetnyilvánítások

Ezúton mondok köszönetet mindazoknak, akik hozzájárultak értekezésem elkészüléséhez.

Külön köszönetemet szeretném kifejezni:

Kónya Albertnek, intézeti vezetőmnnek az értekezés megírására való buzdításáért és a munkához szükséges kedvező feltételek biztosításáért;

Németh Juditnak, értékes tanácsaiért;

Pálla Gabriellának a kézirat egy korábbi változatának figyelmes átolvasásáért és hasznos tanácsaiért;

Vertse Tamásnak az értékes diszkuszióért, a ZR DWBA kód rendelkezésre bocsátásáért és a kézirat gondos átolvasásáért;

Fái Györgynek a diszkuszióért, a ZBM hullámfüggvények rendelkezésre bocsátásáért és a kézirat részletes átolvasásáért.

DEFORMÁCIÓ ELOSZLÁS MEGHATÁROZÁSA EGYKRISTÁLY HORDOZÓK FELÜLETI RÉTEGÉBEN A RÖNTGEN REFLEXIÓS GÖRBE ALAPJÁN*

ZSOLDOS LEHEL

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A közel hibátlan egykristályok deformált, de nem roncsolt, felületi rétege a röntgen reflexiós görbe oldalán oszcilláló járulékot ad. Ennek felhasználásával a deformáció eloszlás meghatározható.

A szórt intenzitás számítási lehetőségeinek tárgyalása után a mérési elrendezéssel szemben támasztandó követelményeket ismertetjük, és példaképpen implantált, ill. diffúzióval adalékkolt szilíciumon végzett néhány mérést mutatunk be.

BEVEZETÉS

A félvezető technológiákban előállított, legfeljebb néhány μm vastag epitaxiás, diffúziós, vagy implantált rétegek egyensúlyi rácsmérete általában különbözik a hordozótól, és ezért az ilyen réteget tartalmazó rendszer feszültséges állapotban van, ami a szelet meggörbülésében is jelentkezik. A görbületi sugár, továbbá a réteg és a hordozó vastagságának ismeretében a rétegben uralkodó átlagos feszültség ki is számítható [1]. Mélységben homogén rétegek esetében ez önmagában is elegendő lehetne pl. az adalék koncentráció meghatározására. (Feltételezve, hogy a határfelületen nem keletkeztek misfit diszlokációk; ez azonban könnyűszerrel kideríthető.) Gyakori probléma azonban a mélységi profil meghatározása, noha erre — a tényleges feladattól függően — többféle lehetőségünk van. Ezek egy része azonban nem roncsolás mentes (pl. SIMS, vagy négytűs ellenállás mérés fokozatos réteg eltávolítással kombinálva). Hatékony és roncsolás mentes eljárás még az α -visszaszórás mérése (RBS), ez azonban speciális nagy berendezést igényel. A diffrakciós módszer ezt is hasznosan kiegészítheti.

A közel hibátlan egykristályok röntgen diffrakciós reflexióinak alakja nagyon érzékeny a kristályrács geometriájának kis változásaira is, és ez lehetőséget ad a mélységi profil teljesen roncsolás mentes mérésére, ha a vizsgálandó tulajdonság (pl. adalék koncentráció) és a rács-geometria változása között egyértelmű kapcsolat van.

A deformált állapot leírása

A deformáció szempontjából a hordozóból és arra felvitt rétegből álló rendszer legfontosabb jellemzője az f misfit paraméter, amely koherensen nőtt kristályos rendszerre

$$f = \frac{a_r - a_h}{a_h}, \quad (1)$$

* Érkezett: 1982. jan. 14.

ahol a_r és a_h a réteg és a hordozó egyensúlyi rácsmérete a határfelület mentén, de a fogalom általánosítható tetszés szerinti, így amorf rétegekre is [1]. Ha a rétegek csak összetételben különböznek egymástól, az egyensúlyi méretek megváltozása általában arányos a c koncentráció változásával

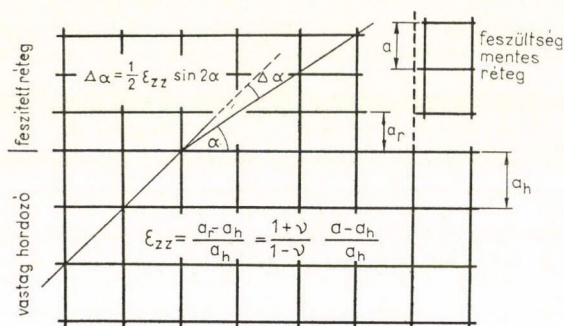
$$f = \frac{1}{a} \frac{da}{dc} \Delta c = A \Delta c. \quad (2)$$

Az A arányossági tényező első közelítésben számítható az atom- (ill. ion) sugarak felhasználásával. Ha az r_0 atomsugarú mátrixba helyettesíthető atomként r sugarú atomok épülnek be, és az atomok száma a térfogategységben N_0

$$A = \left[\left(\frac{r}{r_0} \right) - 1 \right] / N_0. \quad (3)$$

Ilyen közelítéssel azonban pl. Si-ba beépülő B-ra, ill. P-ra $-3,2 \cdot 10^{-24}$, illetve $-1,7 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$ értékeket kapunk és noha a korábbi mérések [2] ennél gyengébb méretváltozásra utaltak, a homogénen adalékolt anyag a rácsméretének megváltozásából $-(5,00 \pm 0,16) \cdot 10^{-24}$, illetve $-(1,72 \pm 0,15) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$ adódik [3]. (Homogén szilárd oldat esetén f egyenlő az ε dilatációval.)

Ha a rácsméret csak a felületközeli rétegben (és a felületre merőleges irányban) változik, akkor a hordozóval való koherens kapcsolat az érintő irányú méretváltozást akadályozza, ezért ilyen irányú főfeszültségek lépnek fel, amelyek haránt kontrakciója (v. dilatációja) növeli a merőleges deformációt (1. ábra). Ha a felületre



1. ábra. A felületi réteg deformációja

merőleges koordináta z és a tangenciális főfeszültség $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, izotrop esetben a deformáció (a feszültségmentes hordozóra vonatkoztatva)

$$\varepsilon_{zz} = f - \frac{2\nu\sigma_{xx}}{E}, \quad (4)$$

ahol ν a Poisson-szám, E pedig a Young-modulusz [4]. A σ_{xx} feszültséget Timoshenko [5] számolta. Ha a w vastagságú kristályban a deformációt a $c(z)$

változó koncentráció okozza a (2) egyenletnek megfelelően, akkor

$$\sigma_{xx} = -A \frac{E}{1-\nu} \left[\left(c(z) - \frac{1}{w} \int_0^w c(z) dz - \frac{3}{w} (2z/w - 1) \int_0^w (2z/w - 1) c(z) dz \right) \right]. \quad (5)$$

Itt a második tag a „feszített” felületi réteg miatt a hordozóban is fellépő átlagos deformációhoz tartozó feszültséget, a harmadik pedig a hasonló okból jelentkező görbület hatását írja le, és ennek megfelelően előjelet vált $z=w/2$ -nél.

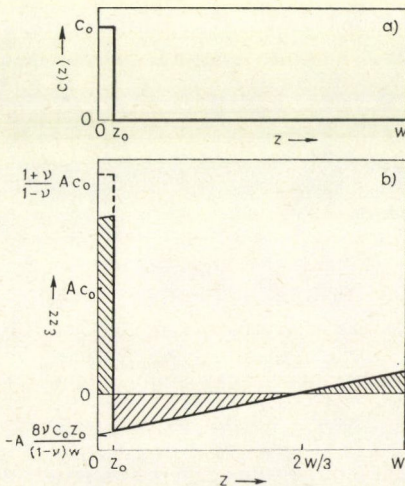
Legyen most $c(z)=c_0$ a $0 \leq z \leq z_0$ tartományban és $c(z)=0$ $z > z_0$ -nál (z_0 vastagságú epitaxiás réteg, 2a ábra), az $u=z_0/w$ jelöléssel, ekkor végül

$$\varepsilon_{zz} = A \left[\frac{1+\nu}{1-\nu} c(z) - \frac{12\nu}{1-\nu} c_0 u \left\{ (1-u) \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{w} \right) + \frac{1}{6} \right\} \right]. \quad (6)$$

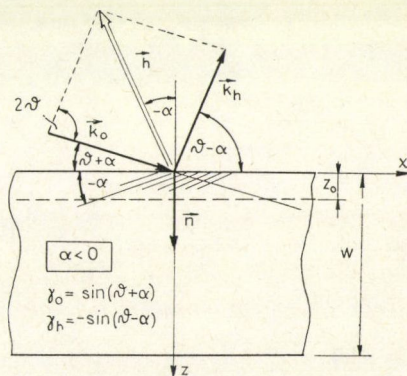
Vegyük észre, hogy ha a réteg elég vékony ($z_0 \ll w$), a második tag ugyan mindenütt elég kicsiny, de csak a $z = \frac{2}{3} w$ helyen tűnik el (a feszültséggel együtt) azaz a neutrális zóna a kristály vastagságának kétharmadába kerül (2b ábra). A felületi rétegre jellemző első tag pedig f -nek kétszerese is lehet.

Kocka rácsú (100) és (111) metszetű anizotrop kristály hasonló deformációját Fukuhara és Takano [3] számította ki.

Ha a koncentráció (ill. a rétegvastagság) meghalad egy kritikus értéket, a határfelület közelében — a feszültség relaxálódása közben — ún. misfit diszlokációk keletkeznek. Ez a deformációt csökkenti és ε_{zz} önmagában nem írja le a deformációs állapotot, ezért ε_{xx} -et is mérnünk kell. Erre az aszimmetrikus elrendezés (l. később) alkalmas [4].



2. ábra. Vékony, homogénen adalékolt réteg koncentráció (a) és deformáció eloszlása (b)



3. ábra. Geometria i paraméterek Bragg-esetben ($\alpha < 0$)

A diffrakciós kép

Megvizsgáljuk, hogy a fent vázolt szerkezetű kristályról szórt sugárzás intenzitása hogyan változik, miközben elforgatjuk a Bragg-helyzet körül (a tengely merőleges a diffrakciós síkra) a 3. ábrának megfelelő geometriában (Bragg-eset). Ez az úgynevezett reflexiós görbe (RG).

Mindenesetre feltételezzük, hogy a z_0 mélységen túl a kristály hibátlan és így az innen szórt intenzitást a diffrakció dinamikus elmélete jól leírja [6, 7, 8]. Térben változóan deformált szerkezetre azonban a dinamikus elmélet alapegyenletei általában nem oldhatók meg analitikusan, de elég jó közelítésekkel élhetünk. Amint azonban látni fogjuk, az út fordítva kevésbé járható. A RG-ből a deformáció eloszlást közvetlenül számítani csak nagyon korlátozottan lehet.

Valamennyi módszer alapja az, hogy a felületi réteg szórását külön számítjuk és az amplitúdókat összegezzük. Ennek eredményét szemléletesen úgy írhatjuk le, hogy interferencia van egyrészt a réteg két oldaláról jövő szórt hullámok között, másrészt a rétegről és a hordozóról szórt hullámok között. Ezek eredőjeként a RG egyik v. mindkét oldalán jellegzetes oszcillációk jelennek meg, amelyek periódushossza fordítva arányos a rétegvastagsággal, kiterjedése pedig a rácsméret átlagos megváltozásával függ össze.

Az intenzitás számítására három lehetőség kínálkozik (amelyeket néha kombinálva is alkalmazunk).

a) A deformált rétegben a szórás *kinematikusrak* tekintjük. Ez természetesen csak akkor jogos, ha vastagsága (z_0) kicsi az l extinkciós hosszhoz képest.

b) *Numerikusan* integráljuk a dinamikus elmélet egyenleteit.

c) Ésszerű közelítések alkalmazásával *analitikusan* próbáljuk előállítani a fenti egyenletek integrálját.

A tisztán kinematikus közelítésben is [9] a réteget önmagukban homogén *al-rétegekre bontják* és ezek szórási amplitúdóit összegzik fázishelyesen. Az eljárás alapvetően matematikus része a z_0 mélység kijelölése. A réteg és hordozó közötti átmenet ui. nem mindig elég éles, és ha z_0 belelóg a dinamikusan leírandó részbe, az ugyanúgy jelentősen változtathatja az intenzitást, mintha „levágunk” a kinematikusan viselkedő rétegből.

Egy-egy mérés értelmezéséhez természetesen feltételezett szerkezetek alapján számított RG-ket hasonlítunk össze a mérttel. Ez egyrészt hosszadalmas, másrészt kétséges, hogy nem adhat-e több, lényegesen különböző modell hasonló intenzitás-eloszlást. Látni fogjuk, hogy a RG alakja szerencsére nagyon érzékeny a deformáció eloszlás kis megváltozására is. A szerkezetet leíró függvények ui. többnyire meglehetősen simák, ezzel szemben az oszcilláló RG nagyon sok információt tartalmazhat. Ennek ellenére érthető a RG közvetlen értékelésének igénye. *Afanasev és munkatársai* [10, 11] meg is mutatták, hogy a deformáció eloszlás átlagos jellemzői (pl. effektív vastagság stb.) a mért RG-ből jól meghatározhatók.

A dinamikus közelítést első ízben *Burgeat és Collela* [12] alkalmazta α -részekkel besugárzott Si vizsgálatára. Ehhez a kissé deformált kristály dinamikus szórását leíró Taupin-egyenletből indultak ki [12–14].

Taupin megmutatta, hogy ha a rács csak annyira deformált, hogy mindenütt értelmezhetjük legalább lokálisan a reciprokrácsot, akkor a dinamikus elmélet alap-

egyenletei segítségével a

$$Q(v) = \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{E_H(v)}{E_0(v)} \quad \left(b = \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \right) \quad (7)$$

szórt relatív amplitúdó változására (γ_H és γ_0 a szórt és beeső sugár iránykoszinusza a 3. ábrának megfelelően, $E_H(v)$ és $E_0(v)$ pedig a megfelelő térerősségek, z helyett egy új v redukált koordináta függvényében) az alábbi differenciálegyenlet írható fel:

$$i \frac{dQ}{dv} + 2(y-p)Q + Q^2 + \delta = 0, \quad (8a)$$

ahol

$$y = \frac{-2b \sin 2\vartheta_B (\vartheta - \vartheta_B) + (1+b)\chi_0}{2C \sqrt{b} |\chi_h|}, \quad (8b)$$

$$\delta = 1 + 2i\chi_h''/\chi_h' = 1 + 2i\kappa, \quad (8c)$$

$$p = \frac{\sqrt{b}}{C|\chi_h|} \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial s_h} (\mathbf{h}\mathbf{u}), \quad (8d)$$

$$v = \frac{\pi z}{l} = \frac{2z \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}}{Ck |\chi_h|}, \quad v_0 = \pi z_0/l \quad (8e)$$

és $k = \omega/c$ a vákuumbeli hullámszám,

$\chi_h = \chi_h' + i\chi_h'' = \chi_h'(1 + i\kappa)$ a szuszceptibilitás h -adik Fourier-komponense,

\mathbf{h} = a diffrakciós vektor,

s_h = a térbeli koordináta a szórt hullám (\mathbf{k}_h) irányában,

\mathbf{u} = az atomok elmozdulása,

C = a polarizációs tényező (a beesési síkra merőleges polarizációnál 1, párhuzamosnál $\cos 2\vartheta_B$).

Az y paraméter a redukált szögeltérés. (Az $|y| \leq 1$ tartományban, abszorpciósmentes hibátlan kristály esetén teljes visszaverődés van, és vegyük észre, hogy az y nevezőjében levő $|\chi_h|$ miatt a teljes visszaverődés fokban mért tartománya $|\chi_h|$ -kel arányos). Az abszorpciót a δ mennyiséggel, a rács deformációját pedig p -ben $(\mathbf{h}\mathbf{u})$ -val vesszük figyelembe. Látszik ebből az is, hogy csak a reflektáló *hálózati síkokra merőleges* és s_h irányában változó deformációnak van szerepe. Ha, mint esetünkben is, lényegében csak mélységfüggő deformáció van

$$\frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial s_h} (\mathbf{h}\mathbf{u}) = 2\varepsilon_{zz} \sin^2 \vartheta_B - \frac{x}{\varrho} \sin 2\vartheta_B + 2 \sin \vartheta_B \sin \alpha \cos (\vartheta_B - \alpha) (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}), \quad (9)$$

ahol a második tag a már említett görbület miatt lép fel (ϱ a görbületi sugár és $\varrho > 0$, ha a minta domború), a harmadik pedig az aszimmetrikus reflexió esetén felépő járuléka [4] (α a felület és a hálózati síkok hajlásszöge a 3. ábrának megfelelően; $\alpha > 0$, ha $b > 1$).

A fenti leírásnál a szuszceptibilitás χ_h'' képzetes részét a χ_h' valós rész mellett általában elhanyagoltuk.

A (8a) egyenlet numerikusan integrálható, a $v = v_0$ mélységtől a szabad felületig, feltételezve, hogy $Q(v_0)$ a végtelen vastag, hibátlan kristály relatív szórt

amplitúdója. Mivel azonban Q általában komplex, két csatolt egyenlet integrálását kell elvégezni. Megemlítjük itt, hogy Fukuhara és Takano [3] közvetlenül a dinamikus elmélet alapegyenleteit integrálta numerikusan. Ehhez először rétegről-rétegre haladva a \mathbf{k}_n vektor változását kellett meghatározni, feltételezve, hogy a felülettel párhuzamos összetevője nem változik és ennek ismeretében lehetett az egyes rétegek járulékát kiszámítani.

Felhívjuk a figyelmet még arra, hogy a (8a) egyenlet a dinamikus hullámtér mindkét módusának viselkedését egyidejűleg figyelembe veszi, a kétféle polarizációs állapotra azonban a számítást külön-külön kell elvégezni.

Petrashen, feltételezve, hogy $f(v > v_0) = 0$, a $0 \leq v \leq v_0$ tartományban $Q(v)$ -t a (8a) egyenletet kielégítő alábbi integrálként állította elő [15]:

$$Q(v) = \exp\left(2i \int_{v_0}^v (y-p) dv''\right) \left\{ Q_p - i \int_{v_0}^v \exp\left(2i \int_{v_0}^{v'} (y-p) dv''\right) (Q^2 + \delta) dv' \right\}, \quad (10)$$

ahol $Q_p = y \pm \sqrt{y^2 - \delta}$ a hibátlan kristályra vonatkozó érték [8], ami biztosítja a $Q(v_0) = Q_p$ határfeltétel teljesítését. A második tényező azonban expliciten tartalmazza Q -t is, ezért érdemes további egyszerűsítési lehetőségeket keresnünk.

A gyakorlati feladatok szempontjából fontos a $v_0 \ll 1$ eset. (A félvezető technológiákban alkalmazott implantálási és diffúziós mélységek lehetnek ilyenek.) A (10) egyenlet első iterációjaként a v' szerinti integrálba $Q = Q_p$ -t helyettesítve $Q_p^2 + \delta = 2yQ_p$ és ez az integrálás elé kiemelhető. Ezzel egy kvázi kinematikus közelítést valósítottunk meg és a szórt intenzitás hányad a kilépő felületen, most már y függvényében

$$R(y)_{v=0} \equiv |Q(v=0)|^2 = R_p \left| 1 + 2iy \int_{v_0}^0 \exp\left(2i \int_{v_0}^{v'} (y-p) dv''\right) dv' \right|^2 = R_p |g(y)|^2, \quad (11)$$

ahol $R_p = |Q_p|^2$. Az $R(y)$ mérhető intenzitásprofil tehát a tökéletes kristály $R_p(y)$ profiljának és a $|g(y)|^2$ deformációtól függő mennyiségnek szorzata.

A tényleges számítás elvégzéséhez a réteget olyan kis v_0/n vastagságú alrétegekre osztjuk, amelyeken belül p állandónak tekinthető és

$$R(y) = |y \pm \sqrt{y^2 - \delta}|^2 \left| 1 - 2iy \sum_{j=1}^n \exp(i\varphi_j) \sin\left[\frac{(y-p_j)v_0}{n}\right] \frac{1}{y-p_j} \right|, \quad (12)$$

ahol

$$\varphi_j = \frac{v_0}{n} \left[2 \sum_{j'=j+1}^n p_{j'} + p_j - y(2n - 2j + 1) \right]. \quad (13)$$

A reflexiós görbe tehát $p(v)$ ismeretében egyszerűen számítható. Fordítva azonban sajnos nem. Az általában komplex $g(y)$ — és ezzel együtt $p(v)$ — az intenzitás-eloszlásból általában nem származtatható le.

Vizsgáljuk meg most, hogyan viselkedik a (11) integrál, ha $v_0 \ll 1$ mellett még az

$$\int_{v_0}^0 p(v) dv \ll 1 \quad (14)$$

feltétel is teljesül. Ez ugyan nagyon szigorú megkötés (amely azt jelenti, hogy a teljes rétegvastagságra integrált elmozdulás kicsi a hálózati síkok távolságához képest) és pl. implantált rétegeknél sem teljesül általában, de ez esetben (11)-ben a belső integrálás könnyűszerrel elvégezhető és az eredmény segít a diffrakciós kép viselkedésének megértésében. Emlékeztetünk azonban még arra is, hogy (9) értelmében p viszonylag nagy deformációk mellett is elég kicsiny lehet, ui. a meghatározó első tag $\sin^2 \vartheta_B$ -vel arányos.

Az integrálás első lépéseként

$$g(y) - 1 = \int_{v_0}^0 2iy \exp \{2iy(v - v_0)\} \exp \left\{ -2i \int_{v_0}^v p(v') dv' \right\} dv. \quad (15)$$

Vegyük észre, hogy ez emlékeztet az $\exp \left\{ -2i \int_{v_0}^v p(v') dv' \right\}$ függvény Fourier-transzformáltjára. Erre majd később visszatérünk.

A v' szerinti integráláshoz, (14)-et kihasználva, a második tényezőt a lineáris tagig sorbafejtjük, és az így kapott szorzat-függvény integrálja végül is a

$$|g(y)|^2 = 1 + 4 \int_{v_0}^0 p(v') \sin 2yv' dv' \quad (16)$$

eredményre vezet. Most tehát $|g(y)|^2 = R(y)/R_p(y)$ és $p(v)$ között kaptunk kapcsolatot. A keresett $p(v)$ így a mérési adatokból inverz szinuszos Fourier-transzformációval meghatározható. Az alkalmazott közelítések természetesen torzítják az eredményt. Ennek legszembeütőbb megnyilvánulása, hogy a szinuszos transzformáció szükségképpen páratlan $p(v)$ -re vezet, tehát a $v=0$ hely közelében $p(v)$ hirtelen 0-ra csökken, ezért a felület közvetlen közelében végeredményben a valódinál kisebb értéket kapunk.

Legyen most, példaként $p = p_0$, ha $0 \leq v \leq v_0$, és $p = 0$ egyébként (vékony epitaxiális réteg). Ekkor (16)-ot integrálva

$$\frac{R}{R_p} = |g|^2 = 1 + \frac{p_0}{y} \sin^2(yv_0). \quad (17)$$

Eredőként tehát $\Delta y = \pi/v_0$ periódusú oszcilláló, de növekvő y -nal lecsengő intenzitást kapunk. A megszokott egységekre áttérve, és a radiánban mért periódushosszat $\delta\vartheta$ -val jelölve,

$$\delta\vartheta = \lambda |\gamma_H| / z_0 \sin 2\vartheta. \quad (18)$$

Ez jó lehetőséget ad a rétegvastagság mérésére is [16], hiszen a fenti összefüggés csupán jól mérhető geometriai adatokat tartalmaz, és teljesen független pl. a réteg kémiai

összetételétől. Felhasználtuk ugyan, hogy v_0 és $\int_{v_0}^v p dv$ egyaránt kicsiny, azonban (18) érvényességét ez nem korlátozza. Véges vastagságú planparalel kristályra a (18) egyenlet általában igaz, a fő maximumtól számított 3–4 oszcillációtól kezdve [8].

Térjünk most vissza az általánosabb esethez, (14)-től eltérően *nagyobb deformációkat is megengedve*, de továbbra is feltételezve, hogy $v_0 \ll 1$. A fentiekből okulva

a (15) integrálban szereplő második tényezőt megpróbáljuk Fourier-sor alakjában előállítani, az alábbiak figyelembevételével:

- a) A függvényt periodikusnak tekintjük $2v_0$ periódushosszal, páros függvényként, tehát kiterjesztve a $v < 0$ tartományra is. Fizikailag ez egyenértékű azzal, mintha két azonos réteget tartalmazó kristály a rétegoldalon koherensen összenőne.
- b) Az exponenciális jelleg miatt a függvény egyetlen perióduson belül is erősen oszcillál, ha $p(v)$ elég nagy, ezért kiemelünk belőle egy $\exp \{-2ip_0(v-v_0)\}$ tényezőt, ahol *most*

$$p_0 = \frac{1}{v_0} \int_{v_0}^0 p(v) dv. \quad (19)$$

Ennek megfelelően legyen [15]

$$\Phi(v > 0) = \exp \left\{ -2i \int_{v_0}^v p dv \right\} = \exp \{-2ip_0(v-v_0)\} \sum_k C_k \exp \left\{ -\frac{i\pi k}{v_0}(v-v_0) \right\},$$

$$\Phi(v < 0) = \Phi(-v), \quad (20)$$

ahol a C_k állandók kielégítik a

$$\sum_k C_k = 1 \quad \text{és} \quad \sum_k C_k C_{k'} = \delta_{kk'} \quad (21)$$

feltételeket, és $g(y)$ a (15) egyenletből nyilvánvalóan meghatározható, ha a C_k együtthatók ismertek. Ha azonban $R(y)$ kellő számú y_k pontban ismert ($k=1, \dots, M$), a C_k együtthatók meghatározása az

$$F = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M S_k [R(y_k)/R_p(k) - |g(C_1, C_2 \dots C_n; y_k)|^2]^2 = \min \quad (22)$$

szélsőérték feladat megoldását jelenti. Itt S_k valamilyen súlyfüggvény és $g(C_1 \dots C_n; y_k)$ pedig az alkalmas C_i ($i=1, \dots, N < M$) paraméterekkel, (20) felhasználásával megadott deformáció függő tényező. Ha ráadásul az összehasonlítási pontok koordinátájaként az

$$y_k = \pi k / 2v_0 + p_0 \quad (2v_0 y_k = \pi k + 2p_0 v_0) \quad (23)$$

értékeket választjuk (15) integrálja (20) felhasználásával a

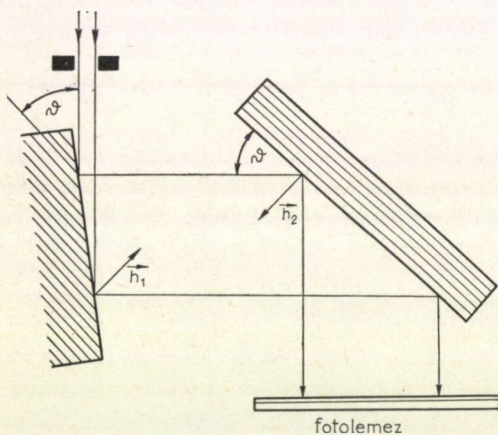
$$g(y_k) = 1 - 2v_0 y_k \left[\frac{2}{\pi} \sum_j C_{k-2j+1} / (2j-1) - i C_k \right] \quad (24)$$

eredményt adja. Sajnos azonban sem p_0 , sem v_0 előre nem ismert. Szerencsére csupán ezek szorzatára van elsődlegesen szükségünk, és ez pl. a bevitt adalékanyag összmennyisége alapján becsülhető.

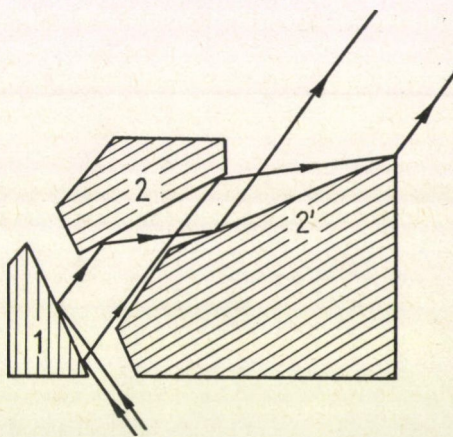
Megállapíthatjuk tehát, hogy elég vékony deformált rétegben a deformáció-eloszlás a reflexiós görbéből elvben közvetlenül is meghatározható, a deformáció nagyságától függetlenül. Vastagabb rétegek esetén viszont nincs más lehetőségünk, mint mérési adatoknak a dinamikus elmélet alapján végzett modell számításokkal való összehasonlítása. Nagy segítséget jelent ebben, ha a réteg több lépésben eltávolítható és minden alréteg eltávolítása után mérjük a reflexiós görbe alakját mindaddig, amíg a hordozót el nem érjük. Így az utolsó mért profilból kiindulva visszafelé felépíthető a teljes deformáció eloszlás [9].

Kísérleti feltételek

A deformációeloszlás meghatározásához a reflexiós görbe kis változásait kell mérnünk. Ehhez mindenképpen nagyon kis divergenciájú, monokromatikus röntgenyaláb és nagyon kis háttér intenzitás szükséges. Ezek a követelmények csak az ún. többkristályos diffraktométerekkel biztosíthatók. A legegyszerűbb a $(+n, -n)$ geometriájú kétkristályos rendszer (4. ábra), amelyben a sugárforrásból kilépő nyaláb először a vizsgálandó mintával azonos összetételű (és szerkezetű), hibátlan monokromátor kristályra esik. A vele *antiparalel* diffrakciós vektorú minta szükségképpen Bragg-helyzetben van a monokromátorról jövő *minden* sugárra. Egy ilyen rendszernek tehát nincs hullámhossz szerinti diszperziója, de éppen ezért nem is érzékeny a spektrumvonalak véges szélességére. A RG-t a második kristály szög helyzetének függvényében mérjük. A többkristályos rendszerekben a monokromatizálás több egymás utáni reflexióval történik, rendszerint egyetlen tömbből kivágott ún. monolit monokromátorral [5. ábra].



4. ábra. Kétkristályos $(+n, -n)$ rendszer, aszimmetrikus monokromátorral



5. ábra. Monolit („chanell-cut”) monokromátor szinkrotron sugárzásához. A $(+m, +n)$ geometriájú első pár (1, 2) a kívánt hullámhosszat vágja ki, a $(+n, -n)$ geometriájú második pár (2, 2') pedig a kis divergenciát és a diszperziómentességet biztosítja [17]

A mérőrendszer paramétereit az alábbi szempontok szerint kell megválasztani [18].

1. A ϑ_B Bragg-szög legyen közel 45° -hoz. Így a kétféle polarizációs állapotból eredő számítási többletmunka elkerülhető.
2. A mintára eső sugárzás divergenciája legyen kicsi a RG szélességhez képest. (A mért görbe a nyaláb irányeloszlásának és a RG-nek konvolúciója.) A RG elméleti félszélessége [8] (a reflektálható nyaláb divergenciája a belépő oldalon)

$$\Delta\vartheta = |\Psi_h|/\sqrt{b} \sin 2\vartheta_B, \quad \left(b = \frac{\gamma_0}{|\gamma_H|} = \frac{\sin(\vartheta + \alpha)}{\sin(\vartheta - \alpha)} \right), \quad (25)$$

és kilépő nyaláb divergenciája ennek b -szerese. Az aszimmetria tényező $b < 1$, ha a beeső sugár éri laposabban a kristályt ($\alpha < 0$, 3. ábra). A súrlódó beesésű aszimmetrikus monokromátor tehát viszonylag nagy szögtartományból „gyűjti” a sugárzást, és ennél sokkal kisebb divergenciával szórja (közben azonban a nyaláb szélesebbé is válik). A hasonlóképpen aszimmetrikus minta geometria pedig enyhíthet a monokromátorral szemben támasztandó követelményeken (szélesedik a RG). A Si néhány reflexiójának $\Delta\vartheta$ félszélességét, a fontosabb egyéb paraméterekkel együtt az 1. táblázatban foglaltuk össze.

3. Az

$$l = \lambda \sqrt{|\gamma_H| \gamma_0} / 2\pi |\chi_h| \quad (26)$$

extinkciós hosszat [8] ne válasszuk feleslegesen nagyra. A $z_0 \ll 1$ ($v_0 \ll 1$) feltétel ugyan egyszerűsíti a kiértékelést, de a reflexiós görbe érzékenyebb a felületi réteg deformációjára, ha l nem nyúlik mélyen be a hibátlan tartományba. Előnyös lehet két különböző mérés, nagy és kis extinkciós hosszal. Az előbbi a direkt értékeléssel alkalmas lehet a deformációeloszlás körülbelüli meghatározására, míg az utóbbi segítségével az eredmény finomítható.

4. A választott reflexió legyen érzékeny a deformáció változásra. Ha csak normális irányú deformáció van,

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{2} \sin 2\alpha - \cos^2 \alpha \operatorname{tg} \vartheta_B = -\sin(\vartheta_B - \alpha) \cos \alpha / \cos \vartheta_B. \quad (27)$$

Itt az első tag a felülettel nem párhuzamos hálózati síkok relatív elfordulásából, a második pedig távolságuk megváltozásából ered (1. ábra). A feszültség érzékenységre a

$$\frac{1}{\Delta \vartheta} \left| \frac{\partial \vartheta_B}{\partial \varepsilon} \right| = (|\gamma_H| + \gamma_0) (|\gamma_H| \gamma_0)^{1/2} / |\chi_h| \quad (28)$$

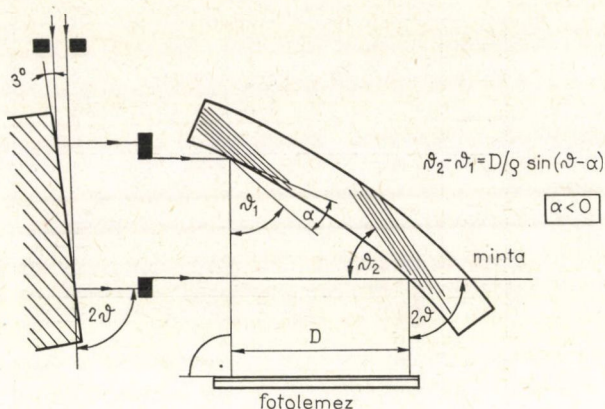
mennyiség jellemző. Az eredményes méréshez szükséges, hogy ez megközelítse a 10^5 értéket. Az erős, nagyon aszimmetrikus, vagy kisszögű reflexiók ilyen szempontból kedvezőtlenek. Előnyösek viszont a keményebb sugarak nagyindexű reflexiói (mert $\Delta\vartheta$ kicsiny), de ilyenkor az extinkciós hossz válik túl nagygyá.

A fentiekben megfogalmazott feltételek részben ellentmondanak egymásnak, ésszerű kompromisszum azonban található. Si vizsgálatához a $\text{CuK}\alpha_1$ sugárzás és a 422, vagy 511 reflexiók használata alkalmasnak látszik.

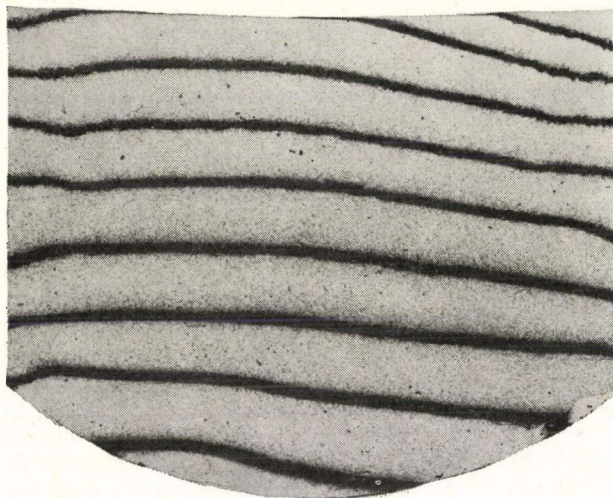
A kísérleti feltételek eddigi tárgyalásánál feltételeztük, hogy a vizsgálandó minta nem görbült. A szokásos 0,2–0,4 mm-es szeletvastagságnál ez sajnos nem biztosítható, ezért az eddigi mérések úgyszólván kivétel nélkül több mm vastag kristályokon történtek. Elvileg azonban görbült kristályon is lehet mérni, sőt a görbület lehetőségét ad arra, hogy az álló kristállyal filmre rögzített elhajlási kép (topogram) segítségével végezzük el a mérést [19], hiszen ha a mintára kiterjedt párhuzamos nyaláb esik, a görbültség miatt ϑ folytonosan változik a minta mentén (6. ábra), csupán kalibrálni kell szögskálát úgy, hogy ehhez egyetlen filmre több, egymás utáni felvételt exponálunk, az egyes felvételek között a kristályt mintegy $10\Delta\vartheta$ -val elforgatva (zebra ábra [20]). A 7. ábra egy ilyen kalibráló felvételt mutat, a 8. ábra pedig egy epitaxiális réteget tartalmazó Si szelet kétkristályos topogramja, amelyen a hordozóhoz és az epitaxiális réteghez rendelhető fő maximumok között jól látható jellegzetes

1. TÁBLÁZAT
A Si néhány reflexiójának fontosabb paraméterei [18]

$\lambda(\text{nm})$	Felület	Reflexió	ϑ_B (fok)	$-\alpha$ (fok)	b	l (μm)	$\Delta\vartheta$ (")	$\left \frac{\partial\vartheta}{\partial\varepsilon} \right \frac{10^4}{\Delta\vartheta}$
$\text{TiK}\alpha_1$ 0,27485	(100)	220	45,70	45,00	0,012	0,3	60,0	0,35
	(111)	220	45,70	35,26	0,183	1,3	15,0	1,5
$\text{CrK}\alpha_1$ 0,22897	(100)	311	44,43	25,24	0,350	1,0	4,6	5,3
	(111)	311	44,43	29,50	0,368	0,9	5,3	4,6
$\text{CuK}\alpha_1$ 0,15406	(321)	422	44,08	40,20	0,068	0,92	5,3	4,1
	(100)	422	44,08	35,26	0,156	1,4	3,5	6,6
	(111)	511	47,55	38,94	0,150	2,1	2,4	9,9
	(111)	422	44,08	19,47	0,465	2,2	2,0	12
	(100)	880	47,72	45,00	0,048	5,2	0,45	48
$\text{MoK}\alpha_1$ 0,07093		866	49,68	46,69	0,052	5,8	0,41	54
	(111)	971						
		11, 3, 1	48,45	40,82	0,133	11,4	0,19	104
$\text{AgK}\alpha_1$ 0,05594	(100)	10, 8, 6	46,83	45,00	0,032	7,7	0,24	90
		10, 10, 0						
	(111)	11, 8, 3	42,40	41,35	0,018	7,4	0,25	84
		13, 3, 1	43,62	42,80	0,014	6,7	0,27	77
		13, 5, 1	46,10	45,33	0,013	6,9	0,27	78



6. ábra. Hengeresen, vagy gömbszerűen görbült mintánál, párhuzamos beeső nyaláb esetén, a beesési szög a hely monoton függvénye



7. ábra. Görbült kristályról készült kétkristályos „zebra-topogram”. Az egyes expozíciók között a kristályt 0,01 fokkal forgattuk el a beesési síkra merőleges tengely körül. (111 orientációjú Si, egyik oldalán diffúziós réteggel; 422 reflexió, $\text{CuK}\alpha_1$ sugárzással)

oszcillációk vannak. A (18) egyenlet alapján ezek távolságából a rétegvastagságra $10 \mu\text{m}$ adódik, kielégítő egyezésben a névleges $9 \mu\text{m}$ -rel.

Ignác és munkatársai [21] egy régebbi hasonló jellegű vizsgálatnál, a diszperziómentes $(+n, -n)$ geometriától kissé eltérő $(+m, -n)$ helyzetben, a kalibrálást a $K\alpha_1$ és $K\alpha_2$ spektrumvonalak szétválása alapján végezték. Az alkalmazott közelítésekben eredő bizonytalanságtól eltekintve is, ilyenkor a diszperzió szükségtelenül szélesíti a RG-t, amit lehetőleg kerülnünk kell.



8. ábra. Erősen exponált kétkristályos topogram egy epitaxiás réteggel ellátott Si kristályról

Görbült kristályok vizsgálatánál a következőkre kell figyelnünk:

- A röntgensugárzással megvilágított terület Δx átmérője legyen nagy az l extinkciós hosszhoz képest [4]. Az 1. táblázat szerint ez nem túl szigorú feltétel.
- A megvilágított terület legyen elég kicsiny ahhoz, hogy a görbület miatt helyfüggő beesési szög ezen belül elhanyagolhatóan keveset változzék a RG $\Delta\theta$ félszélességéhez képest, azaz

$$\frac{\Delta x}{\varrho} \ll |\chi_h|/b \sin 2\vartheta_B. \quad (29)$$

Ezt az előbbi feltételnek megfelelően a (26) egyenlettel kombinálva a ϱ görbületi sugárra a

$$\varrho \gg \lambda \sin \vartheta |\gamma_H|/2\pi|\chi_h|^2 \quad (30)$$

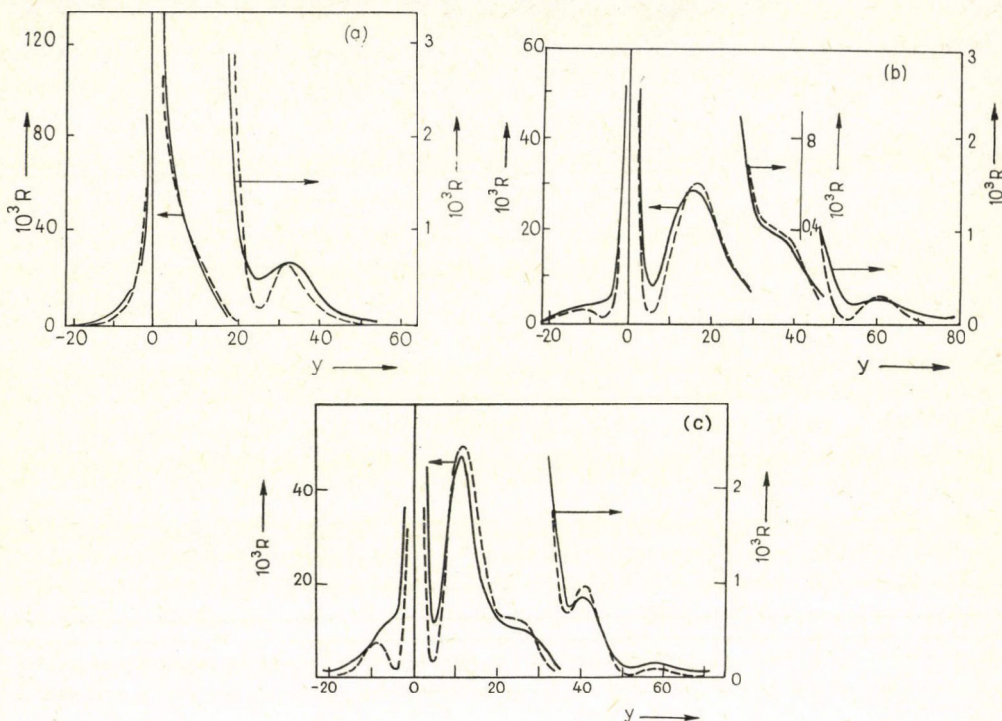
feltételhez jutunk. (Itt a \gg jel azt fejezi ki, hogy a követelmény leszámaztatásánál \gg feltétel kétszeresen szerepelt.) Ismét Si-ra és $\text{CuK}\alpha_1$ sugárzásra, továbbá a szokásos reflexiókra gondolva ez végül is $\varrho \gg 0,5$ m-t jelent, azaz a gyakran előforduló 10–20 m-es görbületi sugár jelentheti a szempontból az alkalmazhatóság alsó határát.

- A görbület önmagában befolyásolhatja az egyébként hibátlan kristály reflexiós görbét is. Tudjuk, hogy a transzmissziós Lang-topográfiában már a 100 m körüli görbületi sugár is kontraszt anomáliához vezethet [22]. Ez elsősorban azzal függ össze, hogy ott a megvilágító nyaláb divergenciája $\Delta\theta$ -nál jóval nagyobb (gömbhullám). Síkhullám esetben is van azonban változás, ha a reflektáló hálózati síkok görbültek. Ezt első ízben *Klar és Rustichelli* [23] vizsgálta a Taupin-egyenlet alapján, hajlított kristályos neutron monokromátorok tulajdonságait tanulmányozva. Mind ebből, mind pedig *Chukovskii és Gabrielyan* [24] későbbi munkájából az derül ki, hogy a (30) feltételnek eleget tevő esetekben az egyébként ideális kristály RG-jének változása már nem számottevő.

Néhány alkalmazás

Az alábbi három példa mindössze azt szolgálja, hogy némi fogalmat alkothassunk a RG-k jellegzetességeiről és érzékenységéről. Különböző szerzők, egymással közvetlenül összehasonlítható méréseiről sajnos nem tudunk, de bemutatunk két, többé-kevésbé hasonló módon implantált Si-on végzett mérést, továbbá egy dif-fúziós profil vizsgálatát.

Kyutt és munkatársai [25] bórral implantált (111) orientációjú Si-ban mérték a deformációeloszlást az ion energia függvényében (40–100 keV tartományban) $3 \cdot 10^{15}$ atom/cm² és $6 \cdot 10^{15}$ atom/cm² implantált dózis mellett. A 9. ábra néhány

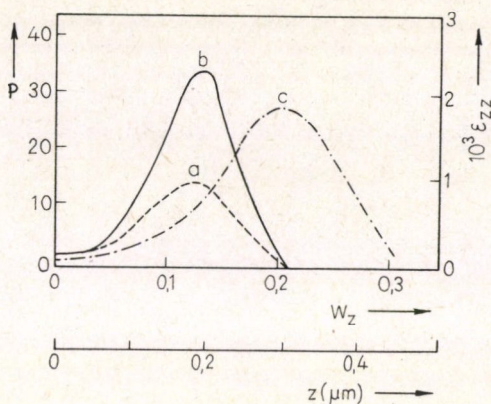


9. ábra. Bórral implantált (111) orientációjú szeletek 111 (szimmetrikus) RG-je, $\text{CuK}\alpha_1$ sugárással; a) 50 keV, $3 \cdot 10^{15}$ atom/cm², b) 50 keV, $6 \cdot 10^{15}$ atom/cm², c) 75 keV, $6 \cdot 10^{15}$ atom/cm². A folytonos vonal a mért, a szaggatott pedig a (11) egyenlet segítségével illesztett profil [25]

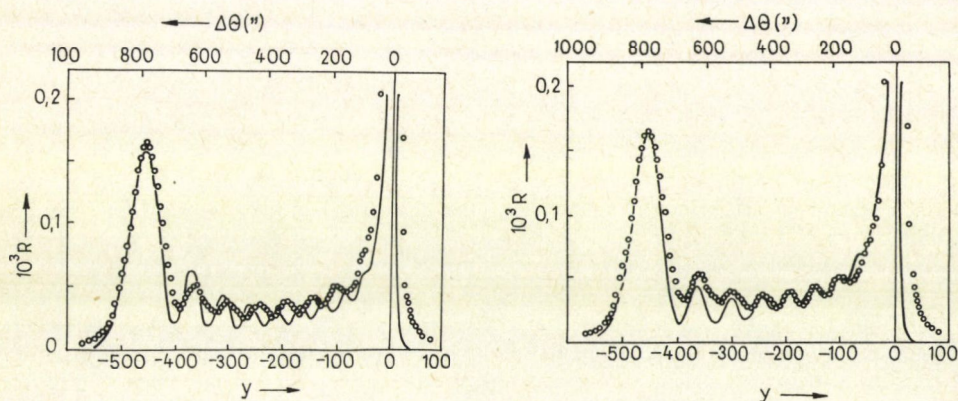
jellegzetes méréseiket, a 10. pedig az ezekhez illesztett deformációs profilokat mutatja. Méréseiknél a monokromátor aszimmetrikus volt, a minta azonban szimmetrikus (111 és 333 reflexiók).

A pozitív deformáció létrehozásában mind a beépülő szennyező atomok, mind a rács geometriai hibái (sugárzási károsodás) részt vesznek, és a deformációs profil maximuma általában összeesik a más mérésekből kapott B eloszlás maximumával, ami a sugárzási károsodás maximumánál mélyebben van, szélessége azonban az előbbi szélességének felel meg.

Másik példánk ugyancsak bórral implantált, de ezt követően lézeresen hőkezelt Si [26]. Itt a rácsba beépült bór már kontrakciót okoz (és sugárzási károsodással nem kell számolnunk). A mért RG-hez (11. ábra) illesztett deformációs profilból



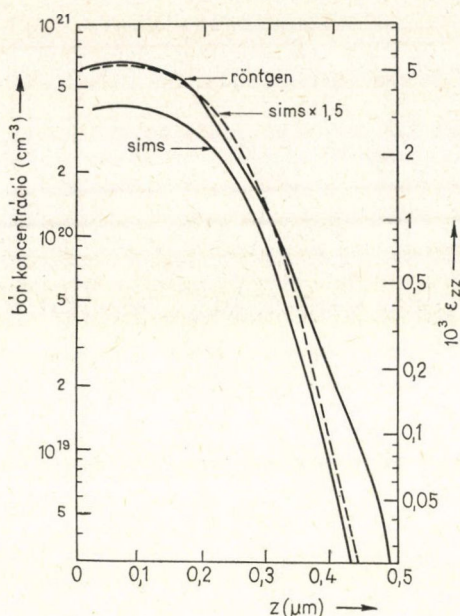
10. ábra. A 9. ábrához tartozó (legjobb közelítést adó) deformáció eloszlások [25]



11. ábra. 35 keV energiával 10^{16} B atom/cm² dózissal implantált és lézeresen hőkezelt (100) orientációjú Si szimmetrikus RG-je. A mérési adatokat pontok jelölik. A folytonos görbe a 12. ábrán megadott deformációs profilból (a), ill. a SIMS profil 1,58-szorosából (b) a (7) egyenlet numerikus integrálásával kapott RG [26]

(12. ábra) Fukuhara és Takano [3] említett mérései alapján számították a bór koncentrációt, a haránt kontrakciónál az anizotrop rugalmas tulajdonságokat is figyelembe véve.

Ezzel párhuzamosan a bór eloszlást SIMS-szel is mérték és bár a két eloszlás sokban hasonló, a SIMS útján nyert bór koncentráció csak mintegy kétharmada a RG-ből kapottnak. (A SIMS mérést a teljes implantált dózishoz normálták.) A különbségre egyelőre elfogadható magyarázat nincs.



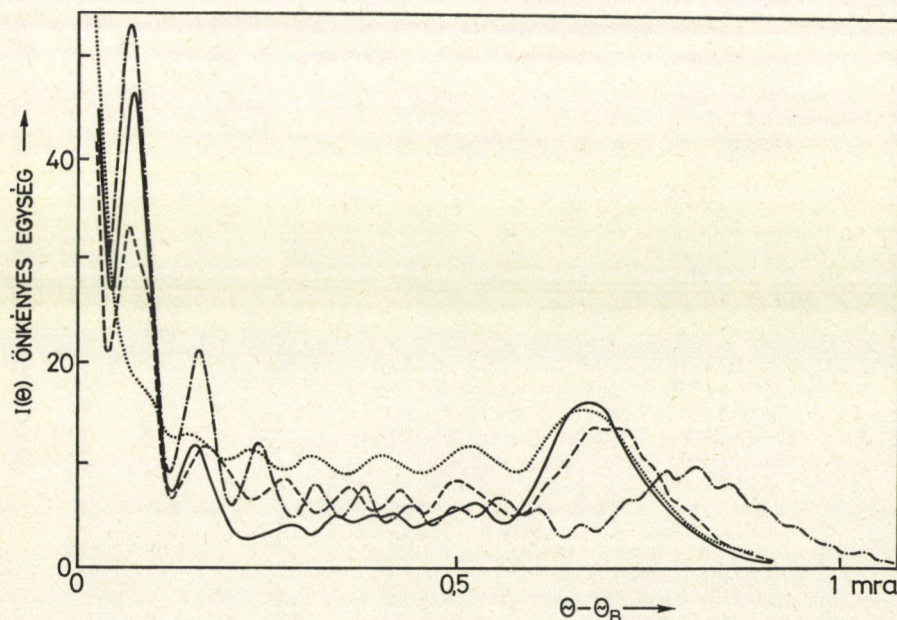
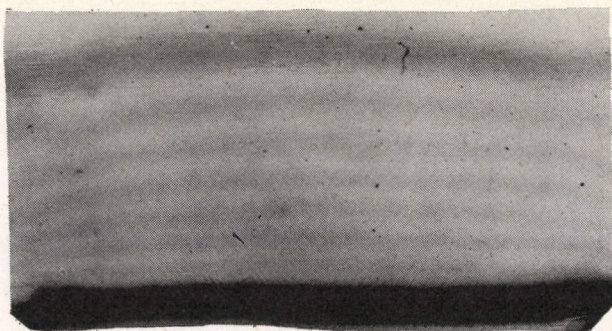
12. ábra. A 11. ábrához tartozó deformáció és koncentráció profilok [26]

A 11. ábra azt is jól jelzi, hogy a RG mennyire érzékeny a deformációs profil változására. Az 1,58-szoros SIMS profilból számolt görbe főként abban tér el a mértől, hogy a két fő maximum között eggyel több mellékmaximuma van, és ez nem a 10^{-20} cm^{-3} alatti koncentrációk látszólag jelentős különbségéből ered, hanem abból, hogy 0,2–0,3 μm -es mélységben az 1,58-szoros SIMS profil a ténylegesnél nagyobb koncentrációt ad, és így a réteg látszólagos vastagsága nagyobb.

A 13. ábra olyan (111) orientációjú Si topogramja (a) és RG-je (b, pontozott vonal), amelybe adalékot oxidból hajtották be a bőrt 1200°C -on.¹ A feltételezett deformációs profilokból (14. ábra) RG-ket kinematikus közelítésben [9] számítottuk. Az egyezés itt mérsékelt, de ugyancsak jól látszik, hogy a deformációs profil kicsiny megváltozása is drasztikus változást okozhat a számított RG-ben.

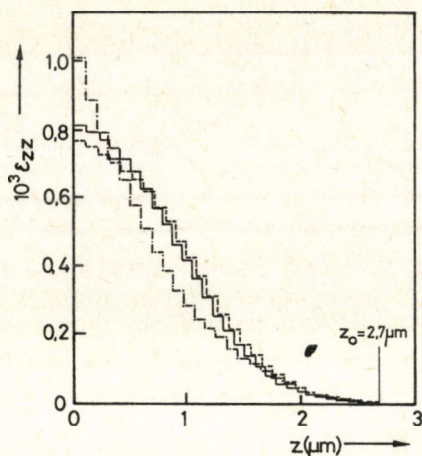
Befejezésül megemlítünk még egy érdekes alkalmazást. *Larson és munkatársai* [27] lézerrel besugárzott (és így a felületén felmelegített) kristály felületi rétegének táglását mérték szinkrotron sugárzás felhasználásával. Az impulzus üzemi lézert a szinkrotron sugárzás impulzusaihoz időzítették úgy, hogy a lézer impulzust követően, $\Delta t \cong 100 \text{ ns}$ elteltével érte a mintát a néhány ns-os szinkrotron sugár impulzus, amelynek RG-jét a már ismertetett módon mérték. A Δt időkülönbség változtatásával így a hőtágulási együttható ismeretében végül is a hőmérséklet térbeli és időbeli változását egyaránt követni tudták.

¹ A méréshez felhasznált minta a Távközlési Kutatóintézetben készült.



13. ábra. Erősen exponált kétkristályos topogram (a) egyik oldalán B diffúzióval ellátott Si-ről (amelyről a 7. ábra is készült) és az erről mért (pontozott vonal), ill. a 14. ábrán vázolt deformációs eloszlásoknak megfelelő kinematikusan számolt RG-k (b). Az egyezés csak a jobb szélső erősebb maximumnál elég jó. Jól látszik a reflexiós görbe „érzékenysége” a deformáció kis változásaira.

A hordozótól eredő csúcs melletti erős oszcillációk nem szinifikánsak



14. ábra. Feltételezett deformációs profilok a 13. ábrán megadott RG-hez. A vonallal jelölt, 1,01 erfc $(0,7 \cdot z)$ -t közelítő függvény az elektromos mérések alapján, első közelítésben feltételezett profil

IRODALOM

1. E. M. Trukhanov, S. I. Stenin, Fiz. i Khim. Obrabotki Materialov 5, 148, 1979.
2. B. G. Cohen, Solid State El. 10, 33, 1967.
3. A. Fukuhara, Y. Takano, Acta Cryst. A33, 137, 1977.
4. P. V. Petrashen, Fiz. Tv. Tela, 16, 2168, 1974.
5. S. Timoshenko, Theory of Elasticity, McGraw—Hill, N. Y. 1934, p. 203.
6. Zsoldos, L., Fiz. Szemle XX., 78, 1970.
7. W. B. Batterman, H. Cole, Rev. Mod. Phys. 36, 681, 1964.
8. Z. G. Pinsker, Dinamicheskoye rasseyanie rentgenovskikh luchey v idealnykh krystallakh, Nauka, Moszkva 1974.
9. V. S. Speriosu, H. L. Glass and T. Kobayashi, Appl. Phys. Lett. 34, 539, 1979. V. S. Speriosu, J. Appl. Phys. 52, 6094, 1981.
10. A. M. Afanasev, M. V. Kovalchuk, E. K. Kovev and V. G. Kohn, phys. stat. sol. (a) 42, 415, 1977.
11. V. G. Kohn, M. V. Kovalchuk, R. M. Imamov and E. F. Lobanovich, phys. stat. sol. (a) 64, 435, 1981.
12. J. Burgeat and R. Collela, J. Appl. Phys. 40, 3505, 1969.
13. J. Burgeat and D. Taupin, Acta Cryst. A24, 99, 1968.
14. D. Taupin, Bull. Soc. Franc., Minér. Cryst. 87, 469, 1964.
15. P. V. Petrashen, Fiz. Tv. Tela 17, 2817, 1975.
16. É. Zsoldos and L. Zsoldos, Coll. Abstr. ECM6, Barcelona 1980, p. 188.
17. J. F. Petroff, M. Sauvage, P. Riglet and H. Hashizume, Phil. Mag. A42, 319, 1980.
18. A. Fukuhara and Y. Takano, J. Appl. Cryst. 10, 287, 1977.
19. L. Zsoldos, Coll. Abstr. ADC '80, Balatonaliga 1980, p. A21.
20. M. Remninger, Z. angew. Phys. XIX., 20, 1965.
21. P. N. Ignác, A. T. Nagy and L. Varga, phys. stat. sol. (a) 15, K87, 1973.
22. L. Zsoldos, Coll. Abstr. ECM2, Keszthely 1974, p. 83.
23. B. Klar and F. Rustichelli, Il. Nuovo Cimento 13B, 249, 1973.
24. F. N. Chukovskii and K. T. Gabrielyan, Fiz. Tv. Tela 21, 1877, 1979.
25. R. N. Kyutt, P. V. Petrashen, L. M. Sorokin, phys. stat. sol. (a) 60, 381, (1980).
26. B. C. Larson and J. F. Barhorst, J. Appl. Phys. 51, 3181, 1980.
27. B. C. Larson, J. F. Barhorst and S. S. Goldenberg, Acta Cryst. A37, C253, 1981.

KÖNYVISMERTETÉS

Sharma—Halme—Butuzov:
Optical Fiber Systems and Their Components
Springer Series in Optical Sciences
Springer-Verlag, Berlin, 1981

A könyv célja: bevezetés a témába. Az ipari háttér: a megfelelő hírközlési rendszer, melynek előnyei: az elektromágneses interferencia megszűnése, kis súly, gazdagság az alapanyagban stb. A feldolgozás tudományos szintje: speciálkollégium mérnök-, fizikushallgatók részére — a felsőbb évfolyamokon, önálló tanulásra is alkalmas.

A fénykeltés, modulálás és detektálás áttekintésével indul a tárgyalás, amelyet korlátoz a cél: a fényemittáló diódák, szilárdtestlézerek, félvezető dióda detektorok működési elvének megértése. A modulálási rész az elektrooptikai, akusztóoptikai és magnetóoptikai effektusok ismertetésére szorítkozik. Ezek után néhány szóban ismertetésre kerül néhány más effektus is, melyek valószínűleg egykor alkalmazásra kerülnek.

A fényterjedés hullámvezetőkben való tárgyalása a két közeg közti sík interface-n való teljes belső reflexió ismertetésével kezdődik és kb. 70 oldal terjedelemben folytatódik a könyvre jellemző inkább magyarázó, mint abszolút pontosságra törekvő tárgyalási móddal, a megértést ábrákkal, intuitív beláttatással segítve. Ez nem jelent nivótlanyságot, csak pedagógiai ügyességet, mely a lényeget emeli ki.

A negyedik rész az optikai rendszerek komponenseit tárgyalja. Bár a dielektromos hullámvezetők gondolatát már 1910-ben *Honores* és *Debye* felvetették, az elgondolás felé csak 1966-ban van *Kao* és *Hockham* kutatásai fordították a figyelmet. Ők állapították meg, hogy a tapasztalt nagyfokú gyengülés (1—10 dB/m) főoka az üvegyanyagban előforduló nemkívánatos szennyezések, s így a gyengülés megfelelő tiszta anyag alkalmazásakor elfogadható mértékre redukálható. A megfelelő technológia azután 20 dB/km (!) értékre redukálta a gyengülést már 1970-re, majd 1979-ben már 0,2 dB/km-re. A szerzők a technológiai folyamatok ismertetése helyett a veszteségi mechanizmussal, az abszorpcióval és a szóródással foglalkoznak. Az abszorpció alapján véve az anyagban történő intrinszc abszorpció, melyben az ionszennyezők, ill. a színcentrumok folytán járulékos abszorpció csatlakozik. A szóródási veszteség járulékos része az üvegben levő inhomogenitás, valamint a törésmutató profil longitudinális változásaiból ered. Ebből következik, hogy a szálak előállítására szolgáló anyagoknak könnyen tisztíthatóknak és hibamenteseknek kell lenniük. E követelményekből kiindulva a 4. fejezetből megismerhetjük a megfelelő szálanyagok előállításának elvi módzatait. Majd találkozunk a különböző lézerekkel, mint optikai forrásokkal, a vékonyréteg modulátorokkal, a fotodetektorokkal. Az emberi szellemnek az alapkutatói eredményeinek technikai felhasználásában elért eredményei teszik ezeket a fejezeteket élvezetes olvasmánnyá. Pl. a csatolás megoldásának problémája az elliptikus emissziós tartománynak cirkuláris képpé való átalakítása, az optikai szál érzékelők, a rács típusú multiplexer, az interferométer típusú multi/de-multiplexer.

A könyv utolsó lapjai szelektált problémákat (38 db) tartalmaznak. (T. Gy.)

Orestes N. Stavroudis:
Modular Optical Design
Springer Series in Optical Science
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1982

Az optikai eszközök készítése és tervezése egyike a legrégebb fizikai-technikai problémáknak. A könyv szerzője szerint az évszázadok alatt összegyűjtött ismeretanyag ellenére ez ma is inkább művészet mint tudomány.

Ezt a „művészetet” próbálja Stavroudis könyve racionális keretek közé szorítani egy új elképzelés az optikai modulátor segítségével.

A könyv bevezetesként röviden felidézi a paraxiális rendszerek tulajdonságait és ismerteti a leképezési hibák leírására szolgáló matematikai paramétereket, majd a Delano-féle $y-y$ diagrammal, ill. annak alkalmazásaival foglalkozik. (A Delano-diagram pontjait úgy kapjuk, hogy a fő sugár optikai tengelytől mért távolságának függvényében ábrázoljuk a marginális sugár optikai tengelytől mért távolságát.) Ezután a két felületű rendszereknek a harmadrendű leképezési hibákra is kitérő viszonylag részletes leírása következik.

A kétfelületű rendszerek tulajdonságai alapján definiálja a szerző a modul fogalmát. A modul két gömbfelületből álló olyan rendszer, amelynek fő fókuszára a harmadrendű szférikus aberráció, megfelelő pupillasíkjaira pedig a harmadrendű asztigmatizmus zérus. A modul fő fókusza, vastagsága és a görbületek a törésmutatótól és két szabad paramétértől függenek. Ez utóbbiak segítségével kontrollálhatók az egyéb leképezési hibák.

A továbbiakban Stavroudis a modulok csatolási lehetőségeivel foglalkozik, majd ennek alapján eljárást ad meghatározott tulajdonságú lencse modulokból való felépítésére. Az eljárás során bonyolult numerikus számításokat kell végezni, ezért csak számítógép felhasználásával kivitelezhető.

A harmadrendű hibák kiküszöbölésekor alkalmazott gondolatmenet magasabbrendű hibák esetén is alkalmazható, a számítások azonban rendkívül bonyolulttá válnak.

Befejezésül a szerző néhány példa részletes kidolgozásával illusztrálja a modulok felhasználását.

A speciális témájú könyv kifejezetten azoknak a szakembereknek ajánlható, akik az optikai rendszerek tervezésének elméleti vonatkozásai iránt érdeklődnek.

Tasnádi Péter

M. Cardona and G. Güntherodt (editors):
Light Scattering in Solids II.
Basic Concepts and Instrumentation
Springer-Verlag, Berlin, 1982

A kötet a Topics in Applied Physics sorozatban a Springer-Verlag (Berlin—Heidelberg—New York) kiadásában M. Cardona és G. Güntherodt szerzők szerkesztésében 1982-ben jelent meg. Folytatása egy 1975-ben azonos címmel kiadott műnek, s egyben egy kialakuló négykötetes sorozat második része. Megírására a témakör igen széles körű és gyorsléptékű fejlődése adott okot. A fényszórás-mérést a természettudományok több területén alkalmazhatjuk (biofizika, vegyipari kutatások, ökológia stb.), a jelen kötet azonban elsősorban a szilárdtest kutatásban érdekelttekhez szól, bár egyes fejezetei általánosabb érdeklődésre tarthatnak számot.

Az első fejezetben a szerzők áttekintik a sorozat már megjelent és előkészületben levő kötetinek tartalmát, majd rövid körképet adnak a fényszórás jelenségek újabban előtérbe került alkalmazásairól.

A második fejezet a rezonancia jelenségekkel foglalkozik. Áttekintést nyújt a fényszórás elméleti klasszikus és kvantummechanikai leírásáról, az egyszerű esetektől a szilárdtesteken fellépő többfononos jelenségekig. E fejezet utolsó harmada egyes félvezetőkben fellépő rezonanciaszóródások kísérleti tapasztalatait is elemzi.

A harmadik fejezet egy napjainkban terjedő technikai megoldást, a többcsatornás optikai detektálást hozza felhasználóközelbe, megismertette a szakmai „szargont” és segítséget nyújtva az eszközválasztáshoz.

Az utolsó, a negyedik fejezet a szilárdtestekben a nemlineáris optikai hatásokra létrejövő fényszóródásról tájékoztat, részletesen bemutatva annak különböző eseteit (Hyper—Raman-effektus koherens, spontán és rezonáns esetben, a koherens antistokes Raman-szórást és a Raman-indukált Kerr-effektust). Ezen új spektroszkópiai módszereket a nemlineáris szuszceptibilitás általános elvén keresztül írja le a kísérleti példákkal és technikai megoldásokkal illusztrálja.

A kötet szerzői a szerkesztő M. Cardona és G. Güntherodt mellett R. K. Chang, M. B. Long és H. Vogt.

A könyvet haszonnal forgatják mindazok, akik a fényszórás ezen új módszereit a szilárdtest-kutatásban, vagy más területen alkalmazni kívánják, hiszen jól rendezett naprakész ismereteket nyújt a kutatási módszerekről.

Tóth Katalin

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1982. április 19. — Terjedelem: 7,35 (A5) iv

82-3465 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
 TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
 KÖNYVTÁRA

Ára: 15,— Ft
Előfizetés kötetenként: 90,— Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Apagyi Barnabás</i> : A magszerkezet szerepe többnukleont átadó magreakciókban	273
<i>Zsoldos Lehel</i> : Deformáció eloszlás meghatározása egykristály hordozók felületi rétegében a röntgen reflexiós görbe alapján	337

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Sharma—Halme—Butuzov</i> : Optical Fiber Systems and Their Components	355
<i>Orestes N. Stavroudis</i> : Modular Optical Design	355
<i>M. Cardona and G. Güntherodt</i> (editors): Light Scattering in Solids II	356

307.226

7

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

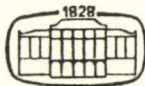
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

9

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

SUGÁRZÁSI KÁROSODÁS FÉMEKBEN

KOVÁCS ISTVÁN és SZENES GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	358
2. A sugárzási károsodás atomi mechanizmusa	359
2.1. Energiavesztési folyamatok	359
2.2. Atomi elmozdulások kialakulása	560
3. A hibaszerkezet tulajdonságai	362
3.1. Diszlokációk	362
3.2. Üregek	363
4. A sugárzási károsodás függése a besugárzó részecskéktől	364
4.1. Sugárzási károsodás reaktorokban	364
4.2. A reaktor károsodás szimulációja	365
5. A hibaszerkezet kifejlődése besugárzás alatt	368
5.1. Ponthiba koncentrációk	369
5.2. Ponthiba nyelők és források	371
5.2.1. Diffúzió éldiszlokációkhoz	372
5.2.2. Diszlokációhurkok keletkezése	373
5.2.3. Üregek képződése	375
5.2.4. Vakancia források	378
5.3. A besugárzás hatása ötvözetekre	380
6. A sugárzási károsodás hatása a mechanikai tulajdonságokra	383
6.1. Sugárzási keményedés	383
6.1.1. Kísérleti eredmények	383
6.1.2. A folyáshatár elmélete	386
6.1.3. Az Orowan mechanizmus	388
6.1.4. Az átvágásos mechanizmus	389
6.2. Sugárzási kúszás	390
6.2.1. Kísérleti eredmények	391
6.2.2. A sugárzási kúszás mechanizmusai	392
6.2.2.1. SIPA Mechanizmus	392
6.2.2.2. Folyási mechanizmus	394
6.2.2.3. Intersticiális diszlokációhurok mechanizmus	394
6.2.2.4. Diszlokáció csúszás mechanizmus	394
6.2.3. Összefoglalás	395

* Érkezett 1981. aug. 19.

1. Bevezetés

Az atomreaktorok üzemelése során a reaktorok szerkezeti elemei elkerülhetetlen sugárzási károsodásnak vannak kitéve. A reaktorok biztonságos üzemeltetése megköveteli azoknak az alapvető folyamatoknak a mélyreható ismeretét, amelyek a szilárd anyagba belépő nagy energiájú részecskék hatására kialakulnak. Elegendően mélyreható ilyen ismeretek birtokában egyrészt biztonság becslés adható valamely szerkezeti elem várható élettartamára, másrészt lehetőség nyílik olyan új anyagok kidolgozására, amelyek az eddig ismerteknél előnyösebb fizikai és mechanikai tulajdonságokkal rendelkeznek, és ami még fontosabb, nagyobb ellenállást tanúsítanak a sugárzási károsodással szemben.

Az ilyen anyagok lehetővé teszik a reaktorok hatásfokának lényeges megjavítását, ami a közvetlen (becslések szerint évi 10^9 \$ nagyságrendű) haszon mellett nagymértékben meggyorsíthatja az áttérést a hagyományos energiatermelési módszerekről az atomenergiára.

A reaktorsugárzással szemben ellenállóbb szerkezeti anyagok kidolgozása tehát igen nagy gazdasági kihatású probléma, amely egyidejűleg rendkívül érdekes tudományos feladat is. A megoldáshoz szükség van a különböző sugárzások és a szilárd anyagok kölcsönhatásainak mélyreható vizsgálatára, új alapvető ismeretek megszerzésére a fémfizika terén és azok alkalmazására reális rendszerekre. Olyan konkrét gyakorlati probléma megoldására irányuló kutatási tevékenységről van szó, amely egyben elméletileg is fontos alapkutatási feladat is.

A reaktorok szerkezeti anyagának igen sokrétű követelményeket kell kielégíteniük. Nagy szilárdságúaknak kell lenniük, de nem lehetnek ridegek, méretüket stabilan meg kell tartaniuk stb. Mindezen tulajdonságaikat a tartós sugárzás hatása során is, minimális túrési határon belül, meg kell őrizniük.

A jelenleg üzemelő hasadási reaktorok szerkezeti elemeiben a sugárzási károsodás hatása általában csak évek alatt válik jelentőssé. Ez természetesen kedvező a reaktor működése szempontjából, de a szerkezeti anyagok kísérleti vizsgálata reaktorban elhelyezett próbatesteken nagyon hosszadalmas és drága. Ehelyett célszerű olyan szimuláló kísérleteket végezni, amelyek során a vizsgált anyag sokkal gyorsabban végigmegy mindazokon a fázisokon, amelyeken végigmennek a reaktorban levő anyagok. Világos azonban, hogy az ilyen kísérletek csak akkor vezethetnek megbízható következtetésekre, ha az egyes folyamatok során működő mechanizmusokról pontos ismeretekkel rendelkezünk.

Még súlyosabb nehézségek jelentkeznek a leendő fúziós reaktorok esetén. Ezeknél a reakcióteret határoló első köpenyt várhatóan 10^{14} – 10^{15} neutron/cm²·s neutron fluxus éri, amelynek kb. 10–25%-a a D–T reakcióból származó nagy energiájú (14,1 MeV) neutron lesz. Ezeknek a hatása a sugárzási károsodás mellett magreakciókat is fog eredményezni, ezek He és H keletkezésével járnak együtt, amelyek a kísérleti tapasztalatok szerint jelentősen befolyásolják a sugárzási károsodás milyenségét is. Mivel jelenleg a fentieknek megfelelő neutronforrások még nem léteznek, ezért a fúziós reaktorok szerkezeti anyagainak várható viselkedését szintén csak szimuláló kísérletekkel lehet vizsgálni.

A besugárzott anyag tulajdonságait sok tényező egyidejű hatása eredményezi. Ilyenek az anyag előélete, összetétele, a mechanikai terhelés, a magas hőmérséklet, az atomi elmozdulásokból származó szerkezeti változások, gázok (He, H) különböző formában való jelenléte stb. Ezek együttes hatása a szerkezeti és mechanikai stabili-

tásra jelenleg csak kevésbé ismert. Az elkövetkezendő években még sokrétű és mélyreható elméleti és kísérleti vizsgálatok szükségesek ahhoz, hogy a sugárzási károsodás során kialakuló folyamatokat és szerkezeti változásokat részleteiben megismerjük. Ez döntő fontosságú mind az anyagszerkezeti ismereteink fejlődése, mind a reaktor szerkezeti anyagok biztonságos és gazdaságos tervezése szempontjából.

2. A sugárzási károsodás atomi mechanizmusa

2.1. Energiaveszteségi folyamatok

Ha egy részecske belép egy szilárd anyagba, akkor a természetétől függő kölcsönhatásba lép az anyag ionjaival (atomjaival) és elektronjaival. Az anyagba való behatolása során ezen kölcsönhatások következményeként mozgási energiáját fokozatosan elveszti.

A sugárzási károsodás szempontjából az alapvető folyamat a részecske rugalmas ütközése az anyag atomjaival vagy ionjaival, mert ez utóbbiak végleges elmozdulása eredeti helyükről csak ilyen ütközések következményeként áll elő. Ha az anyagba belépő részecskének van töltése, akkor jelentős rugalmatlan energiaveszteségek lépnek fel az anyag elektronjainak gerjesztése által. Ionokkal való besugárzás esetén lehetséges energiaátadási folyamat még az anyag ionjaival kialakuló elektronsere is. Ez utóbbi folyamat során elvesztett energia azonban csak néhány százaléka az előző kettőnek.

Az egyes kölcsönhatások révén elvesző energia különböző módon függ a részecske energiájától, ezért az egymáshoz viszonyított jelentőségük a részecske lelassulása során erősen megváltozik.

A rugalmas energiaátadási folyamat klasszikus ütközésként tárgyalható [1]. Ha az M_1 tömegű, u sebességű részecske

$$E_0 = \frac{1}{2} M_1 u^2$$

kinetikus energiával mozog az M_2 tömegű ionokat tartalmazó fémbe és egy ütközés során eredeti irányához képest Φ szöggel térül el, akkor az átadott energia

$$E = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\Phi}{2} = E_{\max} \cdot \sin^2 \frac{\Phi}{2}. \quad (1)$$

A Φ eltérítési szöget a részecske és a fémionok közötti kölcsönhatás természete szabja meg. Ha a kölcsönhatás $V(r)$ potenciállal jellemezhető, ahol r a részecske és az eltérítő ion távolsága, akkor egyszerű klasszikus számítással az eltérítési szögre a következő kifejezést kapjuk [1]:

$$\Phi = \pi + 2p \int_{-\infty}^{R_0} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{M_1 + M_2}{M_2} \frac{V(r)}{E_0} - \frac{p^2}{r^2}}}, \quad (2)$$

ahol $R_0 = R_1 + R_2$, a részecske és az ion effektív sugarainak összege, p a hiperbola ágak aszimptotáinak távolsága. Látható, hogy az eltérítési szög meghatározásához szükség van a $V(r)$ kölcsönhatási potenciál konkrét ismeretére. Határesetként tekintjük a merev gömb közelítést ($V(r)=0$, ha $r > R_0$ és $V(r)=\infty$, ha $r < R_0$), ekkor (2) egyszerűen kiszámítható és a $d\sigma = 2\pi p dp$ differenciális hatáskeresztmetszet abszolútértékére a

$$d\sigma = R_0^2 \frac{dE}{E_{\max}}$$

kifejezést kapjuk. Ebből a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma = \int_0^{E_{\max}} R_0^2 \frac{dE}{E_{\max}} = \pi R_0^2, \quad (3)$$

azaz megegyezik az effektív geometriai keresztmetszettel. Ez nyilvánvalóan igen kis hatáskeresztmetszetet jelent. Ez azért fontos, mert amint ez (2)-ből látható, a merev gömb közelítés megfelel az igen nagy energiájú részecskék esetének, amikor $E_0 \gg V(r)$ minden $r > R_0$ érték mellett. Ez azt jelenti, hogy a nagyon nagy energiájú részecskék rugalmas ütközésekkel csak kevés energiát veszítenek el, azaz csak csekély mértékű sugárzási károsodást okoznak (kis valószínűséggel fordul elő, hogy kilöknek ionokat a helyükről). Más szóval az ütközés nélküli szabad úthossz ilyenkor nagy.

Csökkenő E_0 energiával a $V(r)$ kölcsönhatási potenciál hatása egyre jelentősebb lesz, az ütközési hatáskeresztmetszet nő, s végül olyan nagy lesz, hogy a szabad úthossz gyakorlatilag a szomszédos ionok távolságára csökken le. Csökkenő energiával a részecskék hibakeltő hatása tehát jelentősen megnő.

Az ütközési folyamatok kvantitatív tárgyalása csak közelítőleg valósítható meg, mert a $V(r)$ potenciált exakt formában nem ismerjük. Az elméleti számításokban empirikus potenciálokat szokás felvenni [1—3], amelyek segítségével az ütközéskor átadott energiák, ill. az ütközési hatáskeresztmetszet meghatározhatók, majd helyesgük a kísérletekkel való összevetésből ellenőrizhető.

A nagy energiájú töltött részecskék energiavesztése elsődlegesen a fémionok elektronjainak gerjesztésével (az ionok további ionizációjával) megy végbe. Az ennek során fellépő energiacsere nem eredményez sugárzási károsodást (nem vezet hibakeltéshez), mert a gerjesztett állapotú ionok a helyükön maradnak. Az ilyen folyamatok során leadott energia jelentősen függ a kölcsönható részecskék töltésétől is, ezért egységes tárgyalásuk nem lehetséges. A hosszegységnyi elmozdulás során elvesztett energia közelítőleg arányos a töltött részecske (ion) sebességével [4], legalábbis közepes nagyságú sebességek esetén [5]. Ezeknek a folyamatoknak a részleteivel itt nem foglalkozunk, de nyilvánvaló, hogy ismeretük alapvetően fontos a hibakeltés szempontjából is. Ugyanis ezen folyamatok szabják meg a töltött részecskékre azt a behatolási mélységet, amely mentén hibakeltés gyakorlatilag nem történik.

2.2. Atomi elmozdulások kialakulása

Ha a rugalmas ütközések hatáskeresztmetszete elegendően nagy, akkor nagy valószínűséggel bekövetkeznek olyan ütközések, amelyek során egy rácspontban levő ionnak átadott energia elegendő ahhoz, hogy az ion az eredeti helyét tartósan elhagy-

ja. Az ionok ilyen elmozdulásai eredményezik a sugárzási károsodást. A keletkező kristályhibák száma az elmozdult ionok számától függ, ezért a besugárzás mértékét, a sugárzási dózist, célszerű ezzel a számmal jellemezni. A következőkben a dózist az egy atomra jutó elmozdulások számával, dpa -val (elmozdulás per atom) fogjuk jelölni. Ennek nagysága a különböző kísérleti körülményeknél széles határok között változhat, 10^{-6} – 10^2 nagyságrendű lehet.

Egy elsőként kilökött (primer) ion által keltett további elmozdulások n száma [6, 7]:

$$n = 0,8 \frac{E_r}{2E_d}, \quad (4)$$

ahol E_r a rugalmas ütközések során elvesztett energia, E_d pedig az ún. küszöbenergia, amely minimálisan szükséges ahhoz, hogy egy ion a helyéről végleg elmozduljon. Kristályos testekben E_d függ az anyagi minőségtől és az elmozdulás irányától, átlagértéke jó közelítéssel 30 eV-nak vehető.

A (4) alatti elmozdulás sorozatot elmozdulás kaszkádnak nevezzük. Ez azáltal jön létre, hogy az elsőként kilökött ion általában még lényegesen nagyobb kezdeti E_k kinetikus energiával (néhány 100 keV) rendelkezik, mint az E_d küszöbenergia. Az így szerzett kinetikus energiát részben elektron gerjesztéssel, ill. ionizációval, részben rugalmas ütközésekkel, azaz további ionok kilökésével elveszti. A másodlagosan stb. kilökött ionok hasonló folyamatokat keltenek mindaddig, amíg az utoljára kilökött ionok energiája E_d értéke alá nem csökken. A folyamat során számos vakancia és intersticiális atom (Frenkel pár) keletkezik, amelyek további sorsát részben a kaszkád természete, részben a kísérleti körülmények határozzák meg. Ezekkel a jelenségekkel foglalkozunk a 3. fejezetben.

Egy kaszkád kialakulásához jellegzetes időtartamok kapcsolódnak. A primer ütközés időtartama kisebb mint 10^{-16} s, míg a primer ion az energiáját kb. 10^{-13} s alatt veszíti el. Az eközben kialakuló hibaszerkezet relaxációja stabilabb konfigurációba 10^{-12} s körüli idő alatt megy végbe (ennyi idő alatt csökken le a meglökött ionok energiája a termikusnak megfelelő értékre) [8]. A stabilabb konfigurációk csak elegendően alacsony hőmérsékleten maradnak meg tartósan, növekvő hőmérséklettel a sugárzással keltett stabilabb hibák is fokozatosan eltűnnek [9, 10].

Az egy atomra jutó elmozdulások számának meghatározásához két dolog ismeretére van szükségünk. Az egyik az adott E_k energiájú primer atomhoz (ionhoz) tartozó kaszkádban bekövetkező (4) alatti elmozdulások száma. Ilyen vizsgálatok általában számítógépes szimulációval végezhetők el. A kaszkád szerkezete és ezáltal a kialakuló hibák tulajdonságai függenek a besugárzó részecskék természetétől, a minta sugárzás alatti hőmérsékletétől, az anyag minőségétől és szerkezetétől. Kristályos anyagban a kaszkádban egymást követő ütközések meghatározott irányokba (szoros illeszkedésű síkokban fekvő atomsorok irányába) fókuszálódnak. Ezekkel a kérdésekkel részleteiben nem foglalkozunk, hanem az irodalomra utalunk [11–13].

Ha egy adott E_k energiájú primer atom (ion) által kialakított kaszkádban elmozdult atomok számát ismerjük, akkor az adott dózishoz tartozó összes elmozdulások meghatározásához ismernünk kell még a primer atomok energiaeloszlását. Ez természetesen függ a kérdéses sugárzás természetétől. Neutronok [14] és elektronok [15] esetén a primer atomok energiaspektrumának meghatározása viszonylag jól kidol-

gozott, és ionok esetén is vannak már eredmények [16—18]. A primer ionok energia-spektrumának ismeretében a teljes dpa meghatározható. A következőkben a sugárzási dózist ezzel a mennyiséggel fogjuk jellemezni. A kísérleti tapasztalatok szerint a sugárzási dózis arányos a sugárzás ϕ fluxusával és t időtartamával, azaz $dpa \sim \phi t$.

3. A hibaszerkezet tulajdonságai

A sugárzás hatására bekövetkező atomi elmozdulások a kezdeti időpillanatban azonos számú vakancia és intersticiális atom létrejöttét eredményezik. Ezek kezdeti eloszlása azonban jelentősen megváltozik. A változás mértéke és milyensége a kísérleti körülményektől (pl. a sugárzás energiája, intenzitása és dózisa, a minta hőmérséklete stb.) függ. Elegendően magas hőmérsékleten a hibák termikus aktiválással mozoghatnak, ami részben az eltűnésüket (vakancia-intersticiális rekombináció), részben hibakomplexek létrejöttét eredményezi. A hibák bizonyos mértékű átrendeződése még $T=0$ K-en is bekövetkezne a ponthibák közötti rugalmas kölcsönhatás eredményeként. Az ilyen spontán rekombináció csak akkor nem jön létre, ha a vakanciák és intersticiális atomok távolsága egy kritikus értéknél nagyobb. Ez a tény az elérhető hibasűrűsége egy felső határt eredményez, még olyan alacsony hőmérsékleteken is, ahol a hibák termikusan aktivált mozgása nem lehetséges.

Magasabb hőmérsékleteken, ahol a hibák termikus aktiválással mozoghatnak, számos diffúzió kontrollált folyamat alakul ki, amelyek a ponthibák kondenzációjához, azaz diszlokációhurkok [19, 20], illetve üregek [21] keletkezéséhez vezetnek.

A diffúzió hatására jelentős változások léphetnek fel az ötvöző atomokat (vagy szennyezőket) tartalmazó fémekben is. Egyrészt a lehetséges hibakomplexek száma növekszik az ötvöző atomok és a saját ponthibák kölcsönhatása által, másrészt az ötvözet termodinamikai állapotának meghatározásához új paramétereket is számításba kell venni [18]. Lényeges változások következhetnek be a kiválások nukleációjában, a túltelített szilárd oldatok stabilitásában, sőt a kiválások szerkezetében is [22]. Ugyanakkor a szennyező atomok jelentősen befolyásolhatják a diszlokációhurkok és üregek nukleációját [23]. Ez utóbbiak stabilizációjában jelentős szerepe lehet, pl. neutronokkal való besugárzáskor magátalakulások során keletkező, He és H gáznak is [24].

A besugárzott anyag végső hibaszerkezete láthatóan igen összetett folyamatok eredményeként áll elő. A következőkben röviden áttekintjük az egyes hibák jellemzőit.

3.1. Diszlokációk

A sugárzásnak kitett anyag eleve tartalmaz diszlokációkat, amelyek sűrűsége és eloszlása az anyag előéletének a függvénye. Ezek jelenléte a sugárzási károsodás szempontjából igen lényeges, mert nyelőket jelentenek a sugárzás során keletkező ponthibák számára.

A sugárzás hatására azonban új diszlokációk is keletkeznek az intersticiális atomok és vakanciák diszlokációhurkokba történő kondenzációja által. A kétféle diszlokációhurok tulajdonságai azonban jelentősen különböznek egymástól.

A sugárzási kaszkádban keletkező ponthibák közül az intersticiális atomok általában már a besugárzás hőmérsékletén rendkívül mozgékonyak. Ezért a kaszkád centrumán kívüli keletkező intersticiális atomok rövid időn belül részben a meglevő

diszlokációkhoz diffundálnak, részben lokális többlet atomsíkot képező csoportokba állnak össze, amelyeket diszlokációvonal határol. Az ilyen intersticiális diszlokációhurkok a besugárzás során folyamatosan növekszenek. Ugyanis ezek stabilitása a hurok területének növekedésével nő, ami további intersticiálisok abszorpciójával, ill. a hurok határáról történő vakancia emisszióval következhet be [20]. Az így kialakuló intersticiális diszlokációhurkok jelentősen növelik a kristály diszlokáció-sűrűségét.

A kaszkád centrumában fekvő rácspontokból kilökött atomok nagy számú vakancia visszamaradását eredményezik. Ezek részben rekombinálnak a közeli intersticiális atomokkal, míg a megmaradók a hőmérséklettől függő mértékben meglevő nyelőkhöz diffundálnak, vagy az intersticiális atomokhoz hasonlóan atomsíkok mentén diszlokációhurkokba kondenzálódnak. Az így keletkező vakanciahurkok tulajdonságai lényegesen különböznek az intersticiálisokétól. A méreteik igen kicsinyek (kb. 15 \AA [25]) és az élettartamuk véges [19]. Ennek az az oka, hogy ezek a hurkok szintén abszorbeálnak intersticiális atomokat és emittálnak vakanciákat, de mindkét folyamat csökkenti a vakanciahurkok méretét. Véges élettartamuk ellenére jelentős szerepük van az üregképződésben és a sugárzás hatása alatt végbemenő kúszásban [26]. Ezeknek a jelenségeknek a mélyebb megértése még nagy számú további vizsgálatot igényel.

3.2. Üregek

A sugárzási károsodás egy jellegzetes és technológiai szempontból is alapvetően fontos következménye az üregképződés. A jelenséget felfedezése [27] óta rendkívül széles körben vizsgálták [21, 28], de megértésében még ma is számos hiányos terület van. Az üregképződés térfogatnövekedéssel jár együtt, amelynek nagysága a dózistól függ. Ha a dpa értéke egység nagyságrendű, akkor a relatív térfogatváltozás rozsdamentes acélban kb. 0,1%.

Az üregképződésnek alapvető oka az, hogy az intersticiális atomok számára (a nagy mérethatásuk miatt) a diszlokációk jelentős mértékben intenzívebb nyelőket jelentenek, mint a vakanciák számára. Ezért alkalmas körülmények között a vakanciák túlsúlyban maradnak a károsodott környezetben, ami tiszta vakancia áramok, s ezen keresztül üregek kialakulását eredményezi. Az alkalmas körülményeket elsősorban a besugárzás hőmérséklete szabja meg. Egyszerű megfontolásból következik, hogy az üregképződés sem túl alacsony, sem túl magas hőmérsékleten nem várható. Az üregek kialakulása ugyanis nagy számú vakancia összegyülemmlését teszi szükségessé, ami csak viszonylag hosszú távú diffúzióval valósulhat meg. Nagyon alacsony hőmérsékleten a vakanciák még egyáltalán nem, vagy csak alig, míg az intersticiális atomok már erősen mozgékonyak [9, 10]. Emiatt ilyenkor csak intersticiális diffúzió van és nagy a valószínűsége annak, hogy az intersticiálisok vakanciával találkozva rekombinálnak, mielőtt a vakanciák nagyobb távolságra elmozdulhatnának. Ugyanakkor az esetleg kialakuló vakanciahurkok itt még stabilak és nem képeznek magokat az üregképződéshez.

Ha másrésről a hőmérséklet olyan magas, hogy a vakanciák keletkezése termikus aktiválással már jelentős, összehasonlítva a sugárzás által keltett vakanciákkal, akkor az esetleg kialakuló üregek erősen instabilakká válnak. Ugyanis az üreg felületi energiája a kristály szabadentalpiáját növeli, ami egy hajtóerőt eredményez arra, hogy az üreg vakanciát emittáljon, s ezzel fokozatosan megszűnjön.

Az eddigi kísérletek azt mutatják, hogy üregek képződése közelítőleg a $0,3T_m$ – $0,5T_m$ hőmérséklet intervallumban valósul meg (T_m az olvadáspont hőmérséklete). Természetesen mind a hőmérséklet intervallum, mind a keletkező üreg mennyisége függvénye a sugárzás internitálásának, továbbá az anyag kezdeti mikroszerkezetének (ez utóbbi határozza meg az eleve meglévő ponthiba nyelők számát). Az üregek kialakulásában és stabilizációjában lényeges szerepe van továbbá, mint már említettük, az anyagban meglévő, vagy a sugárzás során (n, α) , (n, p) reakciókban keletkező He és H gáznak.

Meglepő módon az üregek tiszta fémekben rendeződni tudnak és szuperrácsot alkotnak. A szuperrács követi a besugárzott anyag szerkezetét. Pl. nikkelben fcc molibdénben tck szuperrács alakul ki. A szuperrácsot alkotó üregek mérete jó közelítéssel egyforma. A jelenség alacsony hőmérsékleten, $0,3T_m$ körül alakul ki és mind neutronokkal, mind nehéz ionokkal kiváltható, ami azt bizonyítja, hogy a rendeződési folyamat nem függ a hibakeltés sebességétől és nincs összefüggésben a He ionok jelenlétével. Az üregek rendeződését jelenleg még nem tudjuk kielégítően megmagyarázni.

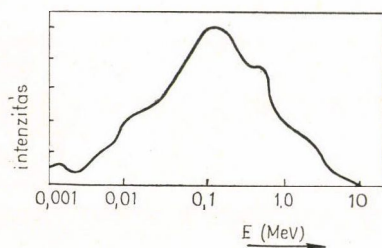
Az eddigiekben tárgyalt hibák képződésének mechanizmusára és a hibák mechanikai tulajdonságaira való hatására még visszatérünk. Ezelőtt azonban röviden áttekintjük a különböző részecskékkel történő besugárzás hatásait, elsősorban azt a szempontot szem előtt tartva, hogy a reaktorokban fellépő neutron sugárzás hatása hogyan szimulálható más típusú részecskékkel, különösen nehéz ionokkal történő besugárással.

4. A sugárzási károsodás függése a besugárzó részecskéktől

4.1. Sugárzási károsodás reaktorokban

Az 1. ábra tipikus, gyors reaktorokra jellemző neutron energiaszórás görbét mutat [29]. Látható, hogy bár a görbe maximuma $0,1$ MeV-nél van, a neutronfluxus jelentős része rendelkezik 1 MeV-nél nagyobb energiával. A nagy energiájú neutronok károsító hatása a reaktor szerkezeti anyagaiban egyrészt az atomi elmozdulások létrehozásában, másrészt (n, α) , (n, p) reakciókon keresztül He és H keletkezésével jelentkezik. A reaktor magjában a nagy energiájú neutronok maximális fluxusa elérheti a 10^{15} n/cm²·s értéket [30].

Ha a sugárzásnak kitett anyag tömegszáma A , és a neutron kinetikus energiája E_0 , akkor a rugalmas ütközések során az ionoknak átadott E energia (1) alapján a



1. ábra, Tipikus gyors neutron spektrum

$$0 < E \leq \frac{4A}{(1+A)^2} E_0$$

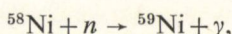
határok között változik. Ha egy ion kilökéséhez szükséges küszöbenergiát 30 eV-nak vesszük, akkor a hibakeltéshez szükséges minimális neutron energiának pl. vasban 400 eV körülinek kell lennie. Ha a neutron energiája ennél sokkal nagyobb, akkor alakulhat ki elmozdulás kaszkád. A kaszkádban keletkező Frenkel párok száma

növekszik ugyan a primer ion energiájával, de a hibakeltés hatásfoka csökken, mert a nagy energiájú ionok elektromos vesztesége megnő. Elméleti becslések szerint egy 1 MeV energiájú neutron kb. 300 elmozdulást idéz elő [30].

A különböző típusú reaktorokban a neutronok különböző energiaeioszlása miatt lényegesen különböző kaszkádok alakulnak ki a reaktor üregét határoló szerkezeti anyagokban [31]. Ez elsősorban a primer ionok energiaeioszlásában jelentkezik. Pl. vasban 14 MeV-es neutronok esetén (fúziós reaktor) a maximális primer ion energia 1 MeV körüli érték, míg a hasadási reaktorok esetén ennek csak kb. a harmada lehetséges. Nem világos jelenleg, hogy az ilyen jelentősen különböző primer ion energiájú kaszkádok hasonló hibaszerkezet kialakulására vezetnek-e vagy sem [24].

Kísérleti és elméleti vizsgálatok egyaránt azt mutatják [12, 32, 33], hogy ha a primer ion energiája nagyobb egy bizonyos \bar{E} értéknél (néhány 10 keV), akkor a kaszkádban szubkaszkádok jelennek meg. Ez annak a következménye, hogy a rugalmas ütközések hatáskeresztmetszete csökkenő energiával nő. A kaszkádban megjelenő, a primerhez képest kisebb energiájú ionok ezért lokálisan jól elkülönülő nagy sűrűségű hibákat (szubkaszkádokat) keltenek. Ezek számbavétele lényeges, mert a különböző kaszkádok szubkaszkádjai átfedhetik egymást, ami megváltoztathatja a kialakuló hibaszerkezetet egy alacsonyabb energiájú, de ugyanolyan *dpa* dózisé sugárzáshoz képest. A vizsgálatok szerint a keletkező hibák száma a nagyenergiájú kaszkádokban arányosnak vehető a rugalmas ütközések során elvesztett energiával.

A neutronok által okozott sugárzási károsodás fontos jellemzője még — mint már említettük —, hogy magreakciók által He és H keletkezik az anyagban. Pl. Ni-ben a He keletkezése a következőképpen, két lépésben megy végbe:

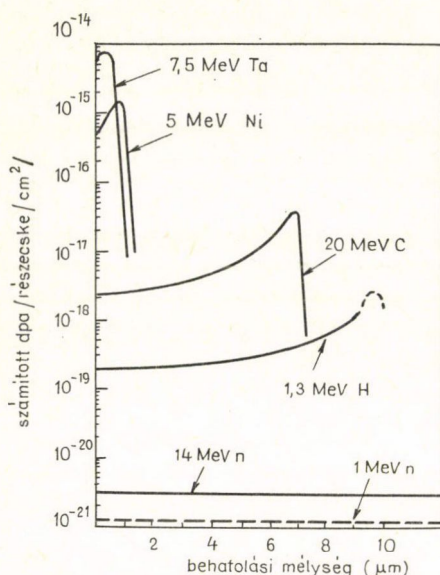


Az ilyen folyamatokban tehát szennyező atomok is keletkeznek, amelyek szintén befolyásolhatják a kialakuló hibaszerkezetet, mert ugyanúgy viselkednek, mint az anyagban eleve meglevő ötvöző atomok.

A keletkező He koncentráció függ a besugárzás dózisától, 1–60 *dpa* dózisé elérheti a néhány ezer appm értéket [24]. A He keletkezésének fontos jellemzője, hogy a besugárzás alatt egyenletesen megy végbe mind az anyag térfogatában, mind időben. Ez utóbbi különösen fontos azért, mert a hibákkal egy időben keletkező He ionok diffúziós áramai a hibákkal együtt alakulnak ki, emiatt a besugárzás során folyamatosan vesznek részt a végső hibaszerkezet létrehozásában.

4.2. A reaktor károsodás szimulációja

A reaktorokban fellépő átlagos neutronfluxus jelentős károsodást (hibaszerkezetet) csak évek alatt okoz. Az ilyen hibaszerkezetek beható tanulmányozásához feltétlenül szükség van olyan besugárzási módszerek alkalmazására, amelyek segítségével a sugárzási károsodás folyamata felgyorsítható úgy, hogy ekvivalens dózisek esetén a károsodás mértéke és a hibák tulajdonságai elfogadható határon belül azonosak legyenek. Az ilyen szimuláló besugárzások nagy energiájú töltött részecskékkal, elektronokkal és ionokkal valósíthatók meg.



2. ábra. A hibakeltés határfoka különböző részecskék behatolási mélységének függvényében

a szimulációs kísérleteket magasabb hőmérsékleteken kell végezni, és ez a hőmérséklet a fenti egyenlőségből határozható meg. A későbbi vizsgálatok felhívták a figyelmet az azonos hibaszerkezet fontosságára. Minthogy ezt döntően a primér atomok energiaspektruma határozza meg, ez a feltétel korlátozást jelent az adott anyagszámítások esetében felhasználható ionokra.

Az elektron besugárzást, mint hibakeltési módszert már régen alkalmazzák [34], azonban elsősorban a keletkezett hibák eltűnési folyamatainak vizsgálatára [9, 35–37]. A reaktorokban lejátszódó károsodási folyamatok szimulálási vizsgálata azóta nyert kitüntetett jelentőséget, amióta kísérletileg kimutatták reaktor szerkezeti anyagban (rozsdamentes acélban) üregképződést [27]. Az első nehézionokkal történő szimuláló kísérlet [38] óta ma már széles körben folynak ilyen vizsgálatok [18, 24, 39, 40].

A szimuláló kísérletekben a hibaképződés sebessége a reaktorokhoz képest 10^5 – 10^6 -szorosra is megnövelhető. A nagy feszültségű elektronmikroszkópokban (HVEM) történő besugárzás azzal a rendkívüli előnnyel is együtt jár, hogy a hibakeletkezés dinamikája is valamilyen mértékben közvetlenül megfigyelhető. A transzmissziós elektronmikroszkópia általában is nagy jelentőségű a sugárzási károsodás vizsgálatában, bár alkalmazása körültekintő és fáradságos munkát igényel [41].

A szimuláló kísérleteknek számos előnye, de ugyanakkor számos hátránya is van [42], amelyeket az 1. táblázatban foglaltunk össze. Az előnyök világosak, ezért csak két hátrányos tulajdonságot emelünk ki. Az egyik az igen erősen különböző behatolási mélység a különböző fajtájú és energiájú részecskék esetén. A 2. ábrából kitűnik, hogy amíg a neutronok makroszkópusnak tekinthető anyagban is egyen-

Az üregképződés vizsgálata során számos kutató kimutatta, hogy a $\Delta V/V$ relatív térfogatváltozás arányos a Kt szorzattal, ahol K a hibakeltés sebessége és t az idő. (Az üregképződés elméletével részletesen az 5.2.3. pontban foglalkozunk.) Nelson és Mazey [38] 1969-ben felismerte, hogy ez a linearitás lehetőséget ad az üregképződés folyamatának meggyorsítására nehéz ion bombázással, minthogy a nehéz ionok hibakeltési hatáskeresztmetszete nagyságrendekkel nagyobb a neutronokénál (lásd 2. ábra).

A kezdeti sikerek után rövidesen kiderült, hogy bizonyos korrekciókra szükség van. Így kimutatták, hogy a szimulációs és a reaktor besugárzási kísérletek egyenértékűsége csak úgy biztosítható, ha teljesül a

$$\frac{K_1}{D_{1v}} = \frac{K_2}{D_{2v}}$$

egyenlőség, ahol D_{1v} , D_{2v} a vakanciák diffúziós együtthatója. Ez arra vezet, hogy

letes hibakeltést idéznek elő, addig a töltött részecskék behatolási mélysége csak néhány μm , amely növekvő részecske energiával és tömeggel monoton csökken. Ugyanakkor az egységnyi út befutása során az ionok által okozott atomi elmozdulások száma hat nagyságrenddel is nagyobb lehet a neutronokénál, ami a neutronok nagyon kicsiny rugalmas szórási hatáskeresztmetszetének (10^{-24} cm^2) a következménye. A különböző tömegű és energiájú részecskék erősen eltérő kölcsönhatása a szilárd anyaggal jól érzékelhető a 2. táblázat adatai alapján is, amelyek nikkel besugárzására vonatkoznak. A lényegesen különböző behatolási mélység és dpa produkció miatt a különböző típusú sugárzások erősen inhomogén hibaszerkezetre vezetnek. Látható, hogy már igen vékony ($\sim 10 \mu\text{m}$) mintákban is a minta csak egy meghatározott (a sugárzás felé eső oldalán fekvő) tartományban károsodik, sőt a maximális hibakoncentráció a mintának csak igen kis részére korlátozódik.

A szimuláló kísérletek másik hátránya a primer atomok (ionok) lényegesen különböző energiaspektruma az egyes besugárzó részecskék esetén. Amíg hasadási

1. TÁBLÁZAT

Szimuláló kísérletek előnyei és hátrányai [42]

Előny	Hátrány
1. A károsodás sebessége 10^5 – 10^6 -szoros lehet	1. A rövid behatolási mélységek miatt a minták nem nagyon alkalmasak mechanikai vizsgálatokra
2. A sugárzástól független szennyezők vihetők az anyagba	2. Inhomogén hibaszerkezet
3. Különválasztva vizsgálható az atomi elmozdulások és a fémekben levő gáz hatása a hibaszerkezetre	3. Hőmérsékletkülönbség szükséges a reaktorhoz képest azonos üregképződési sebességhez
4. A minták nem radioaktívak	4. A primer ionok a neutronbesugárzástól eltérő energiaeloszlása, különösen HVEM esetén
5. A hibaszerkezet kifejlődése vizsgálható HVEM-ben	5. A kiválási folyamatok nem feltétlenül szimulálódhatnak
6. Gazdaságos	
7. Új ötvözetek gyors kifejlesztése	

2. TÁBLÁZAT

Különböző ionok behatolási mélysége nikkelben [40]

Részecske	Beh. mélység (μm)
100 keV Ni	0,02
200 keV C	0,25
5 MeV Ni	0,80
46,5 MeV Ni	5,0
20 MeV C	7,0
1 MeV H	6,4
4 MeV H	51,0
45 MeV He	290,0
24 MeV D	630,0
20 MeV H	830,0

neutronok esetén az átlagos primer ion energia pl. Ni-ben ~ 20 keV, addig sajátion esetén ez csak ~ 2 keV, míg 1 MeV-es elektronoknál mindössze ~ 100 eV. Ez utóbbi adat azt is jelenti, hogy elektron besugárzásnál kaszkádok nem keletkeznek. Ezért az elektronok által okozott hibák gyakorlatilag Frenkel párok. Az olyan folyamatok, amelyek szoros kapcsolatban vannak a kaszkádok erősségével és kiterjedésével, jelentősen különbözhetnek a szimuláló kísérletekben a neutron besugárzáshoz képest. Valószínűleg ilyenek pl. az ötvöző atomok kiválását, ill. újraoldódását előidéző hibamechanizmusok, ezért ilyen esetben a szimuláló kísérletből neutron besugárzásra következtetéseket csak nagyon körültekintően szabad levonni. Az egyes besugárzási folyamatokban levő különbségek jól érzékelhetők még a 3. táblázat adatai alapján is [40]. Ebből kitűnik, hogy a neutron (reaktorbeli) besugárzási viszonyokat legjobban a nehézion besugárzás közelíti meg. Hangsúlyozni kell azonban, hogy az összehasonlítható károsodás ionok esetén az anyagnak csak egy kicsiny tartományára, a behatolási úthossz végének környezetére korlátozódik, míg neutronok esetén az anyag károsodása homogén. Ennek ellenére, alkalmas technikával a kérdéses tartomány hibaszerkezete vizsgálható [41], és az ebből levont következtetések nagy valószínűséggel átvihetők a neutronokkal történő besugárzásra is. Általánosan elfogadott az az álláspont, hogy a nehéz ion szimulációs kísérletek jól adják vissza a folyamatok tendenciáját. Kvantitatív becslésekhez azonban az is szükséges, hogy a szimulációs görbék tartalmazzanak néhány neutron besugárzással kapott pontot is.

3. TÁBLÁZAT

Különböző besugárzások jellemzői [40]

	Termikus reaktor	Gyors reaktor	Fúziós reaktor első fal	4MeV H^+	0,2–50 MeV Ni^+ (a beh. mélység végén)	1 MeV e^-
Tipikus dpa/s	10^{-9} — 10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-3}
5 keV-nál nagyobb kaszkádok hányada	0,9	0,99	0,99	0,4	0,8	0

5. A hibaszerkezet kifejlődése besugárzás alatt

A reaktorok működési hőmérsékletén az elmozdulás kaszkádokban keletkező intersticiális atomok és vakanciák egyaránt mozgékonyak. Mozgásuk során különböző nyelőkön (diszlokációk, szemcsehatárok, üregek stb.) eltűnhetnek, egymással rekombinálódhatnak, ill. az azonos fajtájú hibák kondenzációja révén kiterjedt hibák (diszlokációhurkok, üregek) keletkeznek (3. pont). A végső hibaszerkezetet ezen összetett folyamatok eredménye határozza meg. Az utóbbi tíz évben kiterjedt elméleti [43–48] és kísérleti vizsgálatok [49–51] születtek ezen a téren, azonban a jelenségkör pontos megértésétől, éppen rendkívüli összetettsége miatt, még ma is távol vagyunk [52]. A következőkben megkíséreljük áttekinteni az egyes alapvető mechanizmusok kvantitatív leírását.

5.1. Ponthiba koncentrációk

Az előzőekben vázolt folyamatok kvantitatív leírása a kémiai reakció kinetika alkalmazásával valósítható meg [46, 53, 54]. Tegyük fel, hogy a vakanciák és intersticiális atomok pillanatnyi c_v , ill. c_i koncentrációja a sugárzás hatására időegységenként K -val növekszik. Akkor a koncentráció változások sebességére a következő egyenletek írhatók fel:

$$\frac{dc_v}{dt} = (K + K_e) - D_v c_v k_v^2 - \alpha c_i (c_v + c_v^0), \quad (5)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = K - D_i c_i k_i^2 - \alpha c_i (c_v + c_v^0), \quad (6)$$

ahol D_i és D_v a vakanciák, ill. intersticiális atomok diffúziós együtthatója, c_v^0 az adott hőmérsékletre tartozó egyensúlyi vakancia koncentráció. Az egyenletek második tagja az illető ponthiba eltűnését jellemzi a különböző nyelőkön. Ezek lehetnek diszlokációk, diszlokációhurok, üregek, kiválások és oldott atomok stb. Ezek együttes hatását jellemzik a k_v^2 , k_i^2 mennyiségek. Amint a 3. pontban említettük, vannak az anyagban olyan hibák, amelyek nyelői pl. az intersticiális atomoknak, de a vakanciák számára forrást jelentenek (pl. intersticiális diszlokációhurok). Ezért vakanciák nemcsak a K mennyiséggel jellemzett Frenkel párokból, hanem további forrásokból is származhatnak. Az ezekből származó vakancia produkciót (emissziót) a következő kifejezéssel jellemezhetjük:

$$K_e = \sum D_v k_{vs}^2 \bar{c}_{vs}, \quad (7)$$

ahol k_{vs}^2 a vakanciaforrás erőssége és \bar{c}_{vs} az egyensúlyi vakancia koncentráció a forrás határánál [30].

Az (5), (6) egyenletek harmadik tagja a kölcsönös rekombinációt jellemzi. A két egyenlet ezen tagon keresztül csatolva van egymáshoz. Az α rekombinációs együtthatót gyakorlatilag az intersticiális diffúzió szabja meg, mert ez sokkal nagyobb a vakancia diffúziónál. α értéke függ a kristályszerkezettől is azért, hogy egy vakancia közvetlen környezetében hány intersticiális hely lehetséges. Felületencentrált köbös (fck) fémekre $\alpha/D_i \approx 10^{20} - 10^{21}/\text{m}^2$.

Ha a besugárzott anyag stacionárius állapotban van, akkor a vakanciák és intersticiális atomok koncentrációja időben nem változik. Ha feltesszük, hogy a nyelőként jelenlevő kiterjedt kristályhibák (diszlokációk, szemcsehatárok stb.) nem változnak a vizsgált időtartam alatt, akkor a dinamikus egyensúlyhoz tartozó c_v , c_i koncentrációk az (5) és (6) egyenletekből ($dc_v/dt = dc_i/dt = 0$) kiszámíthatók. A következő eredményre jutunk:

$$c_v + c_v^0 = \frac{D_i k_i^2}{2\alpha} [-(1 - \mu) + \sqrt{(1 + \mu)^2 + \eta}], \quad (8)$$

$$c_i = \frac{D_v k_v^2}{2\alpha} [-(1 + \mu) - \sqrt{(1 + \mu)^2 + \eta}], \quad (9)$$

$$\text{ahol} \quad \mu = \frac{\alpha(K_e + D_v k_v^2 c_v^0)}{D_i D_v k_i^2 k_v^2}, \quad \eta = \frac{4\alpha K}{D_i D_v k_i^2 k_v^2}. \quad (10)$$

Érdeemes néhány szélső esetet közelebbről megvizsgálunk. Nyilvánvaló, hogy pl. az (5) egyenletben $D_v k_v^2$ a térfogategységben levő atomok számával megszorozva egy vakancia időegység alatti eltűnésének a valószínűségét adja meg. Ez a mennyiség kifejezhető a következőképpen is [18]:

$$D_v k_v^2 = \alpha_v \cdot v_v \lambda^2, \quad (11)$$

ahol v_v a vakancia ugrási frekvenciája, λ az ugrási távolság és α_v a nyelők sűrűsége. Hasonló kifejezés írható fel az intersticiális atomokra is:

$$D_i k_i^2 = \alpha_i \cdot v_i \lambda^2. \quad (12)$$

Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a besugárzás hőmérséklete olyan alacsony, hogy $K_e \approx 0$, $c_v^0 \approx 0$, azaz $\mu \approx 0$. Ha még a nyelők sűrűsége is kicsiny, akkor a (11), (12) mennyiségek is kicsinyek, ezért ekkor $\eta \gg 1$. Ilyenkor hosszú távú vakancia diffúzió nincs, az egymástól távol levő nyelőket a vakanciáknak csak kis hányada éri el, ezért a vakancia eltűnési folyamatot gyakorlatilag csak a rekombináció szabályozza. Ha felhasználjuk még, hogy az α rekombinációs együttható az intersticiális atomok ugrási frekvenciájával arányos, azaz $\alpha = z v_i$, akkor a megadott közelítések mellett a vakancia koncentráció:

$$c_v = \left(\frac{K \alpha_i}{\alpha_v v_v z} \right)^{1/2}. \quad (13)$$

A másik szélső eset az, amikor a nyelősűrűség olyan nagy, hogy $\eta \ll 1$. Ekkor (8)-ból (11) felhasználásával a vakanciakoncentrációra a következő kifejezést kapjuk:

$$c_v = \frac{K}{\alpha_v v_v \lambda^2}. \quad (14)$$

Ebben az esetben a vakanciaeltűnés szempontjából a rekombináció nem jelentős. A nyelők nagy sűrűsége miatt a vakanciák elérik azokat, mielőtt rekombinálnának intersticiális atomokkal. (14) szerint a stacionárius vakancia koncentráció ilyenkor fordítva arányos a vakancianyelők sűrűségével.

A későbbiekben látni fogjuk, hogy a különböző nyelők csak speciális esetekben és akkor is csak kevésbé különböznek a vakanciák és intersticiális atomok számára, azaz $\alpha_i \approx \alpha_v$. Ez azt jelenti, hogy kis nyelősűrűség esetén a stacionárius vakancia koncentráció független a nyelősűrűségtől. Felhasználva a $\mu \approx 0$, $\alpha_i \approx \alpha_v$ közelítéseket, az intersticiális koncentrációra η nagyságától függetlenül (8) és (9)-ből kapjuk, hogy

$$c_i = \frac{v_v}{v_i} c_v. \quad (15)$$

Mivel bármely hőmérsékleten $v_v \ll v_i$, ezért c_i nagyon kicsiny c_v -hez képest, azaz az intersticiálisok gyakorlatilag teljes mértékben eltűnnek a besugárzás során nyelőkön és rekombinációval.

Magasabb hőmérsékleteken, amikor μ értéke is jelentőssé válik, akkor a vakancia koncentráció nő, amint ez a (8) összefüggésből kitűnik. Ilyenkor azonban mindkét koncentrációt csak a teljes (8) és (9) formulákból lehet meghatározni.

A sugárzással bevitt vakanciák az anyagban végbemenő diffúziót jelentősen meg-

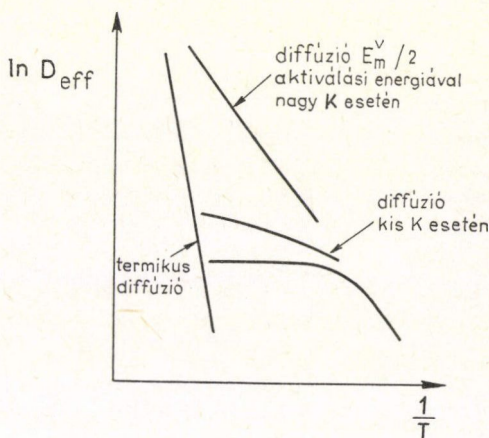
növelik. Célszerű ezért a diffúziót effektív diffúziós együtthatóval jellemezni, amely a következő definícióval adható meg:

$$D_{\text{eff}} = D_v \cdot c_v^{\text{eff}}, \quad (16)$$

$$\text{ahol } D_v = v_0 \lambda^2 = D_0 e^{-\frac{E_m^v}{kT}}, \quad (17)$$

Itt E_m^v a vakancia mozgási aktiválási energiája, $D_0 = v_0 \lambda^2$, ahol v_0 az atomi rezgési frekvencia ($v_0 \sim 10^{12} \text{ s}^{-1}$). (16)-ban c_v^{eff} a (8) alatti teljes vakancia koncentráció. Sugárzás nélküli esetben, tiszta termikus vakanciákra (öndiffúzió):

$$c_v^{\text{eff}} = A e^{-\frac{E_F^v}{kT}}, \quad (18)$$



3. ábra. A sugárzás hatása a fémek diffúziójára

ahol A a preexponenciális faktor, E_F^v a vakanciák képződési energiája [55].

A (13) összefüggés nagy dpa/s sugárzás esetén biztosan érvényes. Ilyenkor (13) és (16) felhasználásával a diffúzió aktiválási energiájára $Q_{\text{eff}} = E_m^v/2$ értéket kapunk. Ez lényegesen kisebb, mint az öndiffúzió $Q = E_F^v + E_m^v$ aktiválási energiája. A sugárzással bevitt vakanciák a diffúziót tehát nagymértékben megnövelhetik (radiation enhanced diffusion).

A (14) összefüggés viszont biztosan érvényes nem túl alacsony hőmérsékleteken, elegendően kis dpa/s sugárzás esetén. (14)-et (16)-ba helyettesítve látható, hogy ekkor a hőmérséklettől független az effektív diffúziós együttható. Mindezek alapján a sugárzás által aktivált diffúziót sematikusan a 3. ábra alapján jellemezhetjük.

5.2. Ponthiba nyelők és források

Az előzőkből kitűnik, hogy a besugárzás alatt végbemenő diffúzió nagymértékben függ az anyagban levő nyelők számától és fajtájától. A nyelők bizonyos fajtái alapvető szerepet játszanak a végső hibaszerkezet kialakulásában, ill. új fizikai folyamatok kialakulását eredményezhetik. Pl. az üregképződés egyik alapvető oka az, hogy az éldiszlokációk kölcsönhatása vakanciákkal és intersticiális atomokkal jelentősen különböző [54]. Ugyanakkor ez a kölcsönhatás jelentősen anizotrop is, ami egy speciális kúszási mechanizmus fellépésében jelentkezik [56].

A besugárzás során három alapvető folyamat megy végbe: 1. a diszlokációszerkezet megváltozása; 2. üregek keletkezése (nukleációja és növekedése); 3. kiválási és oldódási folyamatok kialakulása. Valamennyi folyamat során új nyelők keletkeznek, ill. megváltoznak az eredetileg meglevők. Ennek a rendkívül összetett jelenségnek a részletes elméleti leírása ma még nem ismeretes. Az eddig kidolgozott elméletek számos, nem triviális feltevésen alapszanak és részletekbemenő eredmények csak számítógépes módszerekkel érhetők el [57–61].

5.2.1. Diffúzió éldiszlokációkhoz

A diszlokációk körül kialakuló feszültségterén keresztül a ponthibák kölcsönhatásba lépnek a diszlokációkkal. A kölcsönhatás egyrészt a ponthibák mérethatása, másrészt a mátrixhoz képest különböző rugalmas tulajdonságaik következménye [62]. Ilyen esetben a ponthibák diffúzióját a következő egyenlet írja le:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c - \frac{1}{kT} \text{grad}[cU(\mathbf{r})], \quad (19)$$

ahol $c=c(\mathbf{r}, t)$ a ponthiba koncentráció az \mathbf{r} helyen, a t időben és $U(\mathbf{r})$ a ponthiba energiája a diszlokáció feszültségterében. A (19) egyenlet megoldása általában rendkívül nehéz, elsősorban a megfelelő határfeltételek ismeretének hiánya miatt [63].

Ha egy adott ponthibánál csak a mérethatást vesszük figyelembe, akkor a ponthiba csak az éldiszlokáció hidrosztatikus feszültségével hat kölcsön. Ebben az esetben a kölcsönhatási energia [62]:

$$U(\mathbf{r}) = G \frac{(1+\nu)bV\varepsilon_x}{3\pi(1-\nu)} \frac{\sin \vartheta}{r}, \quad (20)$$

ahol G a nyírási modulusz, b a Burgers vektor, ν a Poisson szám, ϑ és r a ponthiba polárkoordinátái a diszlokációvonalhoz képest. ε_x a hiba mérethatását jellemző relatív térfogatváltozás, $\varepsilon_x = \Delta V/V$. Intersticiális atomokra $\varepsilon_i \sim 1$, míg vakanciákra $-0,5 < \varepsilon_v < -0,2$. E különbségnek két következménye van. Az egyik az, hogy az intersticiális atomok ($\varepsilon_i > 0$) mindig az éldiszlokáció dilatált zónájába, míg a vakanciák ($\varepsilon_v < 0$) elsősorban a komprimált zónájába diffundálnak. Az $|\varepsilon_i| > |\varepsilon_v|$ egyenlőtlenségből pedig az következik, hogy azonos kezdeti intersticiális és vakancia koncentráció esetén nagyobb intersticiális áramok jönnek létre, mint vakancia áramok. Emiatt több intersticiális atom tűnik el az éldiszlokációkon, mint vakancia. A vakancia főleg egymással összetalálkozva csoportokat képez, amelyek üregek nukleusai lehetnek. Az üregek képződése tehát a vakanciák és intersticiális atomok éldiszlokációval való jelentősen különböző, mérethatásból származó kölcsönhatásának a következménye.

Ha feltételezzük, hogy az anyagban a besugárzás kezdetén csak diszlokáció nyelők vannak, akkor az (5), (6) egyenletekben bevezetett nyelőerősségeket a

$$k_i^2 = Z_i \varrho, \quad (21)$$

$$k_v^2 = Z_v \varrho \quad (22)$$

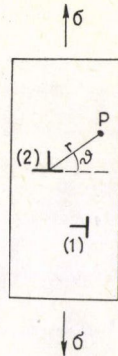
mennyiségekkel adhatjuk meg, ahol ϱ a diszlokációsűrűség, Z_i és Z_v függ a diszlokáció elrendeződéstől [64], a hosszegységre eső lépcsők számától [47], szennyezőktől [65, 66] stb. A kétféle ponthibára vonatkozó eltérést (bias) a következő kifejezéssel szokás jellemezni:

$$B = \frac{Z_i - Z_v}{Z_v}. \quad (23)$$

Ez a különbségi (preference) faktor 1–10% nagyságú lehet [18].

A vakanciák és intersticiális atomok azonban nemcsak mérethatásuk, hanem — mint említettük —, a mátrixhoz képest különböző rugalmas állandók miatt is köl-

4. ábra. Egymásra merőleges éldiszlókációk egytengelyű húzófeszültséggel terhelt testben



csönhatnak az éldiszlókációval. Ez az inhomogenitási kölcsönhatásnak nevezett effektus az előző mechanizmuson nem változtat lényegesen. Jelentősen különböző kölcsönhatást eredményez azonban két egymásra merőleges helyzetű éldiszlókációval akkor, ha az anyagra külső σ húzófeszültség is hat (4. ábra). Tegyük fel, hogy az intersticiális atomok, ill. vakanciák az alábbi rugalmas állandókkal jellemezhetők:

$$\kappa_i = \kappa + \Delta\kappa_i; \quad \mu_i = \mu - \Delta\mu_i, \quad (24)$$

$$\kappa_v = \kappa - \Delta\kappa_v; \quad \mu_v = \mu - \Delta\mu_v, \quad (25)$$

ahol κ a térfogati rugalmassági modulusz, és az index nélküli mennyiségek a mátrixra vonatkoznak. Bullough és Willis számításai szerint [67], ha még fennállnak a következő egyenlőtlenségek:

$$\Delta\kappa_i > 0, \quad 0 < \Delta\mu_i < \mu, \quad (26)$$

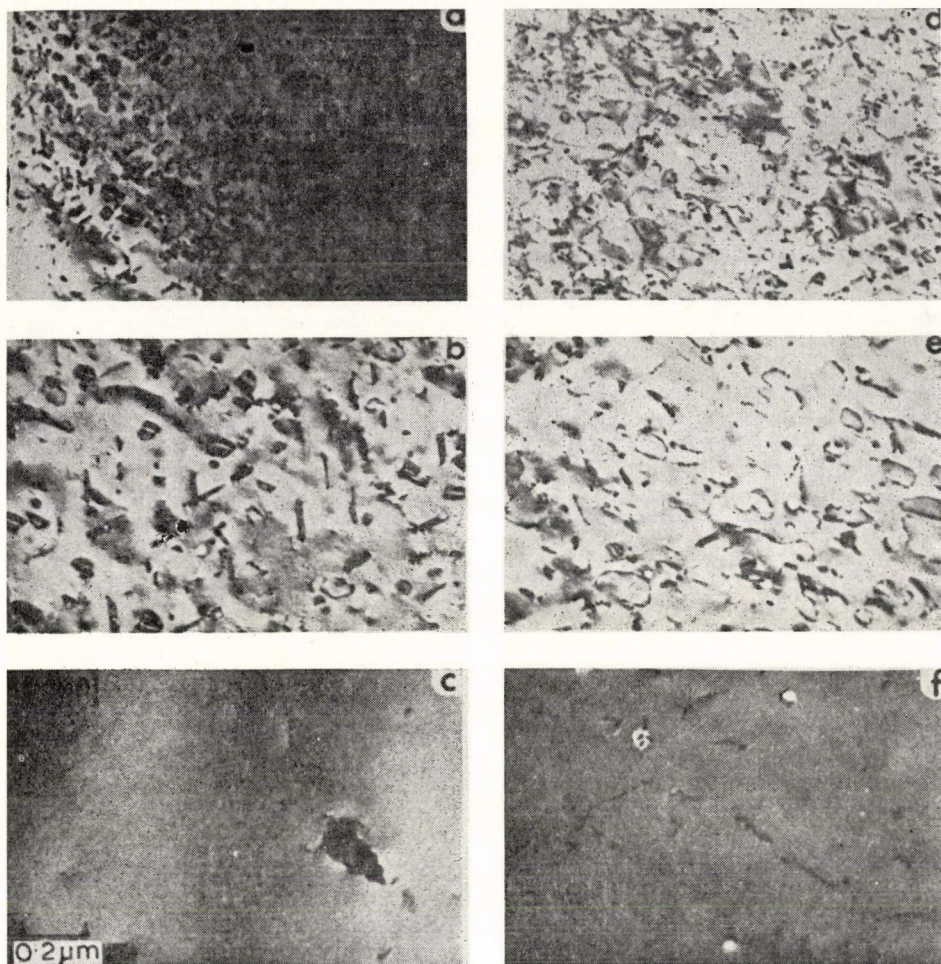
$$0 < \Delta\kappa_v < \kappa, \quad 0 < \Delta\mu_v < \mu,$$

akkor az 1. diszlókációhoz több intersticiális atom diffundál, mint a 2.-hez (4. ábra) és vakanciák esetén fordítva. Ezt a folyamatot feszültség által indukált kitértetett ponthiba abszorpciónak (stress induced preferential absorption, SIPA) nevezik [18]. A folyamat során a két diszlókáció olyan relatív elmozdulást végez, amely a test feszültség irányú megnyúlását (kúszását), és haránt irányú összehúzódását eredményezi [68]. Ezt a folyamatot részletesen tárgyaljuk a 6.2.2.1. pontban.

5.2.2. Diszlókációhurkok keletkezése

A besugárzás során keletkező diszlókációhurkok száma jelentősen függ a hőmérséklettől, a kezdeti diszlókációsűrűségtől, és a szennyező tartalomtól. Ha a diszlókációsűrűség kezdetben kicsiny (10^8 – 10^9 cm $^{-2}$), akkor pl. rozsdamentes acélban nagy számú intersticiális diszlókációhurok képződése figyelhető meg, amelynek mértéke növekvő hőmérséklettel rohamosan csökken [30]. Ez jól látható az 5. ábrán. Adott hőmérsékleten növekvő dózissal a hurkok mérete monoton nő. Kezdetben nagy számú rétegződési hibát tartalmazó hurok alakul ki. Növekedésük során elérik egymást, s ekkor összekapcsolódva (általában a rétegződési hiba megszűnésével) stabil diszlókációhálót képeznek (5. ábra). Ennek során jelentősen növelik a diszlókációsűrűséget.

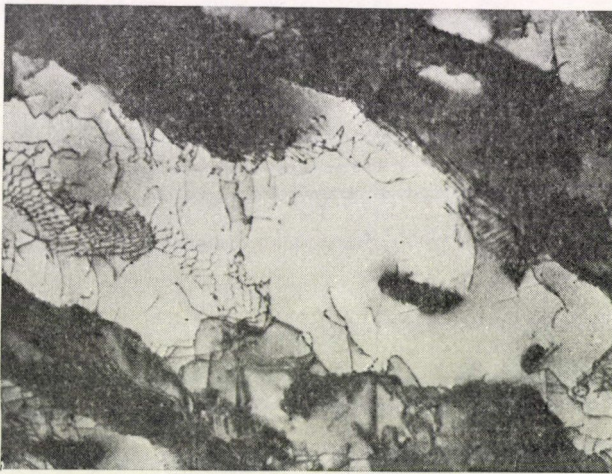
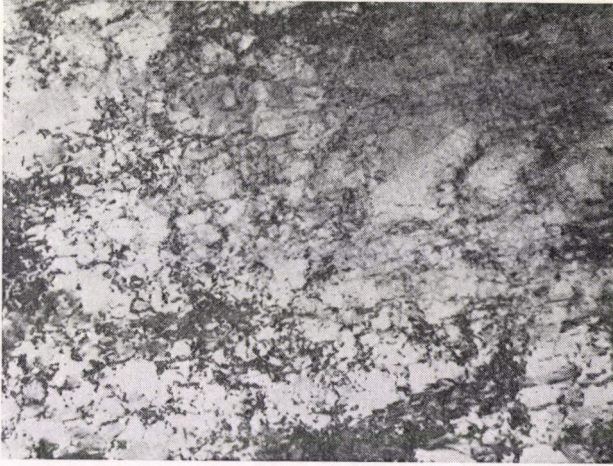
Előzetes képlékeny alakítás a kezdeti hurok képződést jelentősen lecsökkenti, azonban nem túl alacsony hőmérsékleten a sugárzás hatására jelentős lágyulási folyamat is létrejön, amely elegendően nagy dózis után lényegében hőkezelt szerkezet kialakulására vezet. Ez jól látható a 6a, b. ábrán. Ezeket a megállapításokat kvantitatív vizsgálatok is megerősítik [69]. Ilyen eredményeket mutat a 7a, b. ábra. Ebből világosan kitűnik, hogy nagy dózisok után a kialakuló diszlókációsűrűség lényegében



5. ábra. Diszlokáció hurkok keletkezése különböző hőmérsékleteken és dózisoknál gyors reaktorban besugárzott rozsdamentes acélban. 6 dpa: 703 K, 779 K, 853 K, (a—c); 16 dpa: 739 K, 803 K, 843 K (d—f)

független az előélettől. Ugyanakkor növekvő dózissal a diszlokációhurkok száma kezdetben gyorsan növekszik, majd monoton csökken, azonban a megmaradók méretének növekedése miatt a hurkokból származó diszlokációsűrűség monoton nő egy stacionárius értékig.

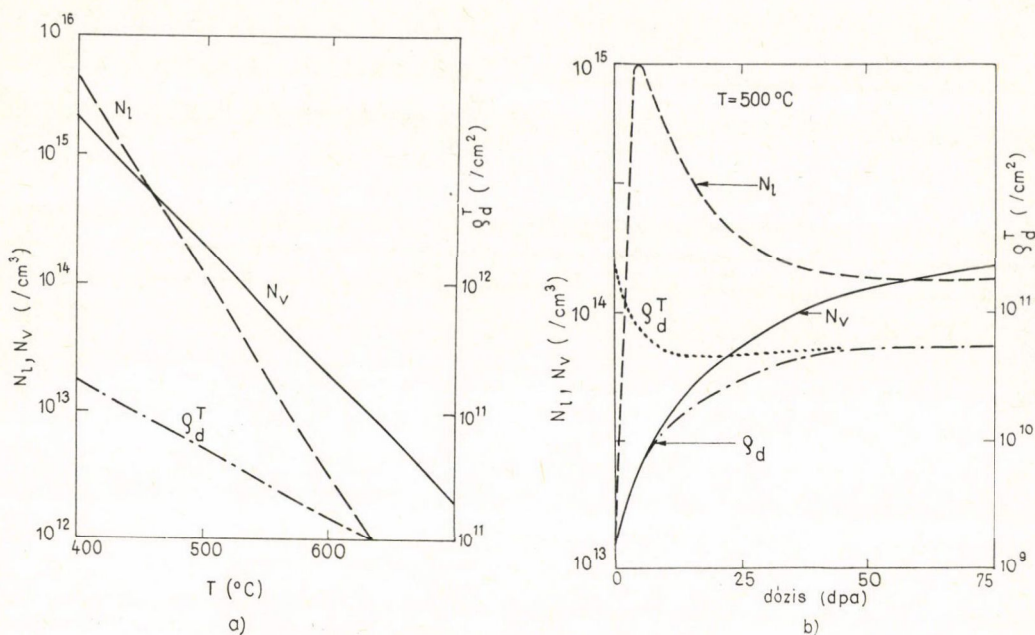
A diszlokációhurkok nukleációjának és növekedésének mechanizmusával kapcsolatban ma még számos nyitott kérdés van. Ezeknek elméleti tárgyalására vonatkozóan az irodalomra utalunk [57—61].



6. ábra. Diszlokációs szerkezet rozsdamentes acélban 20% előzetes hideg alakítás után, a) besugárzás előtt, b) gyors reaktorban 853 K-en 16 dpa dózisú besugárzás után

5.2.3. Üregek képződése

Az üregek képződése szorosan összekapcsolódik a különböző ponthiba csoportok keletkezésével, gázok (He, H) jelenlétével stb. Az üregek nukleációja és növekedése az anyag térfogatnövekedését eredményezi (void swelling). Az anyag térfogatnövekedésének az idő, vagy a besugárzási dózis függvényében való elméleti tárgyalása rendkívül nehéz feladat, mert ehhez az egyes részfolyamatok miatt bonyolult, csatolt differenciál-egyenletrendszer megoldása szükséges. A legújabb vizsgálatok



7. ábra. Diszlokációhurok és üregek száma, valamint a teljes diszlokációsűrűség gyors reaktorban besugárazott rozsdamentes acélban: a) a hőmérséklet függvényében nagy dózis után, b) a dózis függvényében $T = 500^\circ\text{C}$ -on

szerint [57—61, 70, 71] 21 egyenletből álló rendszer megoldása szükséges kémiai reakció kinetika alkalmazása esetén. Ez természetesen csak számítógéppel valósítható meg, s az eredmények kísérletekkel való összehasonlítása az elméletben szereplő szabad paraméterek sok esetben önkényes megválasztásával lehetséges. A részletes számításokat illetően az említett irodalomra utalunk. A következőkben néhány leegyszerűsített esetre vonatkozó alapvető kérdést tekintünk át.

Feltesszük, hogy a kezdeti diszlokáció koncentráció elhanyagolható (bár ennek a nukleációban jelentős szerepe lehet), és csak olyan állapotot vizsgálunk, amikor csak üregek és diszlokációhurok vannak nyelőkként az anyagban. Feltesszük továbbá, hogy ezek eloszlása egyenletes és valamennyi diszlokációhurok, illetve üreg egy-egy átlagos sugárral és nyelő erősséggel jellemezhető, valamint, hogy az üregek nyelő erőssége a vakanciákra és intersticiális atomokra azonos. Ekkor a kétféle hibára a nyelők erőssége [18, 59]:

$$k_l^2 = Z_l q_l + 4\pi r_c N_c, \quad (27)$$

$$k_v^2 = Z_v q_l + 4\pi r_c N_c, \quad (28)$$

ahol q_l a diszlokációk, N_c az üregek sűrűsége és r_c az átlagos üregsugár. Tegyük fel még, hogy $K_e \approx 0$, azaz hanyagoljuk el a vakancia emissziót és az egyensúlyi vakancia-

koncentrációt. Ekkor a relatív S üreg térfogat, ill. a q_l diszlokáció sűrűség növekedési sebességét a következő egyenletek írják le [30, 59]:

$$\frac{dS}{dt} = 4\pi r_c N_c (D_v c_v - D_i c_i), \quad (29)$$

$$\frac{dq_l}{dt} = \frac{q_l}{r_l b} (Z_i D_i c_i - Z_v D_v c_v), \quad (30)$$

ahol r_l a diszlokációhurkok átlagos sugara, amivel $q_l = 2\pi r_l N_l$ és itt N_l a diszlokáció-hurkok sűrűség. Felhasználva az (5), (6) egyenleteket stacionárius esetre, továbbá a (27), (28) kifejezéseket, (30) a következőképpen alakítható át:

$$\frac{dq_l}{dt} = \frac{1}{r_l b} 4\pi r_c N_c (D_v c_v - D_i c_i) = \frac{1}{r_l b} \frac{dS}{dt}. \quad (31)$$

Ha feltesszük, hogy N_l állandó, akkor ez az egyenlet integrálható és a következő összefüggésre jutunk:

$$q_l = \left(4\pi N_l \frac{S}{b} \right)^{1/2}. \quad (32)$$

Eszerint az intersticiális diszlokációhurkoktól származó diszlokáció sűrűség a térfogatnövekedéssel monoton nő. A tett feltevések alapján az összefüggés nyilvánvalóan nagy dózisoknál érvényes, amikor a nyelősűrűség már nagy. Ez a következtetés összeegyeztethető a 7a, b. ábra adataival.

Vizsgáljuk meg még a (29) egyenletet. A (11), (12) és a (14), (15), valamint a (27), (28) egyenletek felhasználásával

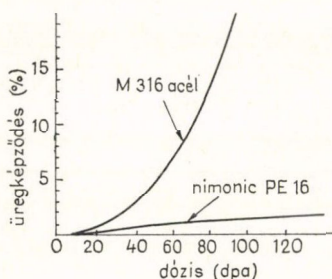
$$\frac{dS}{dt} = \frac{4\pi r_c N_c (Z_i - Z_v) q_l K}{(Z_i q_l + 4\pi r_c N_c)(Z_v q_l + 4\pi r_c N_c)}. \quad (33)$$

Ez az eredmény világosan mutatja, hogy ha a diszlokációk nem lennének különböző erősségű nyelők az intersticiális atomokra és vakanciákra (azaz $Z_i = Z_v$ lenne), akkor nem lenne üregképződés.

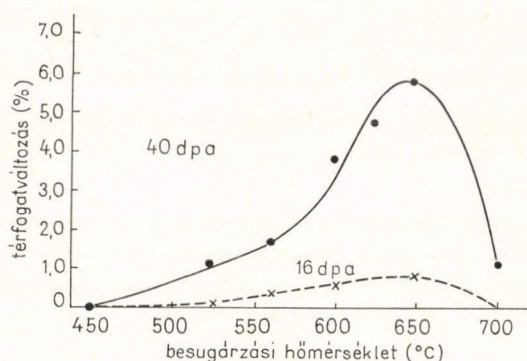
Mivel a (33) egyenlet jobb oldalán szereplő mennyiség nagy dózisoknál csak kevésbé változik, ezért ilyenkor a térfogatváltozás közelítőleg lineáris függvénye az időnek (8. ábra).

A térfogatváltozás hőmérsékletfüggésének meghatározásához számos hatást kellene figyelembe venni. Ilyenek az üregek és intersticiális hurkok nukleációs helyeinek sűrűsége, a rekombináció és vakancia emisszió, diszlokáció szerkezet stb. hőmérsékletfüggése. Egy kísérleti eredményt rozsdamentes acélra mutat a 9. ábra [72].

Az üregképződés részletesebb elméleti tárgyalásával kapcsolatban az irodalomra utalunk [73].



8. ábra. Térfogatváltozás a dózis függvényében rozsdamentes acélban és Nimonic PE 16 ötvözetben [18]. Besugárzás 46,5 MeV Ni^{6+} ionokkal 625 °C-on



9. ábra. A térfogatváltozás hőmérsékletfüggése rozsdamentes acélban. Besugárzás 45,6 MeV Ni^{6+} ionokkal

5.2.4. Vakancia források

A pont hibák nyelői az anyagban termodinamikailag instabil kristályhibák. Emiatt az elnyelési folyamatokkal párhuzamosan mindig vannak emissziós folyamatok is, amelyek a hibák megszűnéséhez vezetnének, ha egyéb hatások nem lennének. Mivel az intersticiálisok képződési energiája nagy és ezért az egyensúlyi koncentrációjuk mindig elhanyagolható, ezért intersticiális emisszióval nem kell számolnunk. Ez kifejezhető úgy is, hogy az intersticiális hurkokban az egy atomra jutó kötési energia nagy [74].

Vakanciák esetén azonban az emisszió valószínűsége már jelentős lehet, amit számításba kell venni. Az emisszió mindig annak a következménye, hogy a vizsgált hiba határfelületén a vakancia képződési energiája kisebb lehet mint a mátrixban azáltal, hogy a vakancia eltűnése a hibából csökkenti a hiba energiáját. Ezért a hiba határfelülete mentén a mátrixhoz képest nagyobb vakancia koncentráció alakul ki, amelynek egy része a mátrixba diffundál.

Tekintsünk először egy vakanciahurkot. Ha az ezt képező vakanciák száma eggyel csökken, akkor csökken a hurkot határoló diszlokációvonal hossza és a hurok területe. Mindkettő energiacsökkenéssel jár együtt. Legyen az n vakanciát tartalmazó hurok megrövidülése miatti energiacsökkenés U_n (ez függ az n -től, azaz a diszlokációhurok sugarától), és legyen a hurok rétegződési hiba energiája γ_r . Akkor az effektív képződési energia a hurok határán

$$E_F^{\text{eff}} = E_F^v - (U_n + \gamma_r b^2), \quad (34)$$

ahol b^2 egy atom átlagos keresztmetszete. Ezzel a hurok határán a vakancia koncentráció:

$$c_l = c_v^0 \cdot e^{\frac{U_n + \gamma_r b^2}{kT}}. \quad (35)$$

ami mindig nagyobb, mint a mátrixbeli egyensúlyi c_v^0 koncentráció.

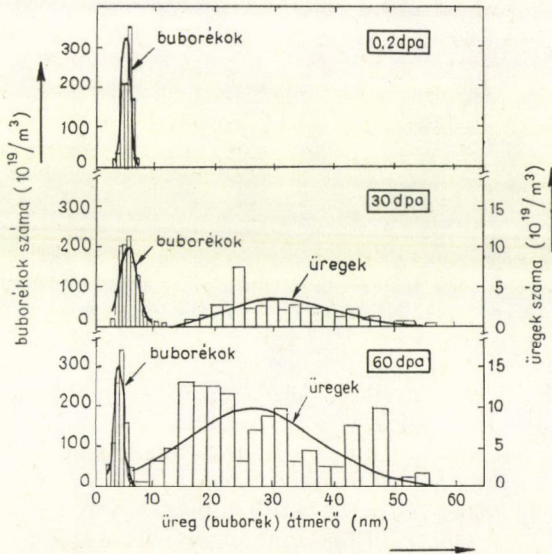
Hasonló megfontolást végezhetünk üreg esetén is. Ha ez egy vakanciát emittál, akkor az üreg határfelülete lecsökken, ami a teljes felületi energia csökkenésével jár együtt. Legyen a fajlagos felületi energia γ . Akkor a vakancia emisszióval együttjáró térfogatsökkenést elősegíti a $p_\gamma = 2\gamma/r_c$ felületi feszültség munkája, $p_\gamma b^3$. Emiatt az üres üregek egy kritikus méret alatt nem stabilak, hanem vakancia emisszióval megszűnnek [75]. Stabil üregek ezért csak akkor alakulhatnak ki, ha a kritikus méret alatt gázt tartalmaznak. A gázt tartalmazó üregeket buborékoknak (bubble) nevezzük. Legyen a gáz nyomása a buborékban p . Ez a térfogatsökkenést megakadályozni igyekszik, emiatt a buborék határfelületén az effektív képződési energia:

$$E_F^{\text{eff}} = E_F^v + \left(p - \frac{2\gamma}{r_c}\right) b^3. \quad (36)$$

Ezzel a határfelületmenti vakancia koncentráció:

$$\bar{c} = c_v^0 \cdot e^{\frac{2\gamma b^3}{r_c} - p b^3 \over kT}. \quad (37)$$

Látható, hogy amíg $p < 2\gamma/r_c$, addig $\bar{c} > c_v^0$, ezért az üreg vakanciákat emittál. Ha $p = 0$, akkor stabil üreg nem alakulhat ki. Ez az oka annak, hogy a neutron besugárzáskor keletkező gázok az üregképződésben alapvető szerepet játszanak. A buborékok és üregek közti kapcsolatot jól látható a 10. ábrán [76], amely a buborékok és üregek számát mutatja nagy nikkel tartalmú acél Ni^{6+} ionokkal való besugárzása után.

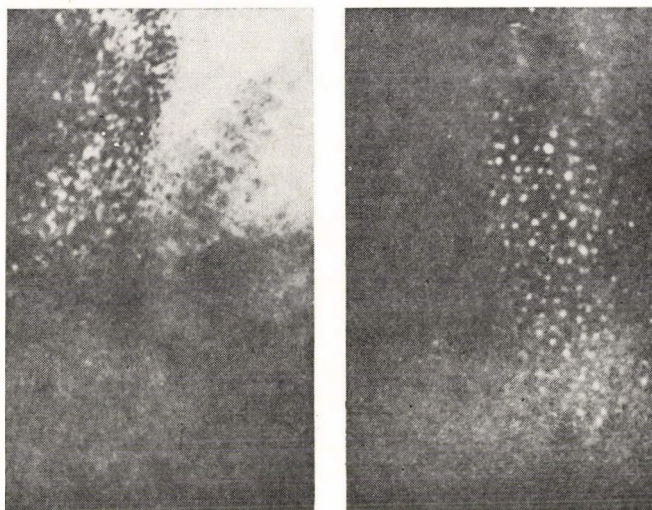


10. ábra. A buborékok és üregek eloszlása nagy nikkel tartalmú acélban 30 és 60 dpa dóziszú, Ni^{6+} ionokkal való besugárzás (625 °C) után. Ezelőtt a mintába 10^3 ppm He-ot implantáltak, amely 0,2 dpa dózissal járt együtt

A besugárzás előtt 10^3 ppm He-ot implantáltak az anyagba 625°C -on. A kis méretű buborékok és a nagy méretű üregek éles elkülönülése a kritikus üregsugár létezését mutatja. A kritikus üregsugárra kapott kísérleti és elméleti értékek ($\sim 5\text{--}10$ nm) elég jól megegyeznek.

5.3. A besugárzás hatása ötvözetekre

A besugárzás által megnövelt diffúzió jelentősen módosítja egy ötvözet egyensúlyi tulajdonságait. Ennek következtében sugárzás nélkül egyensúlyi szilárd oldatban kiválások keletkezhetnek, kiválásokat tartalmazó anyagban pedig a részecskék eloszlása és mérete megváltozhat [22, 77], ill. új típusú kiválások keletkezhetnek [78]. A 11. ábra kiválások feloldódására mutat példát Ni—Al ötvözet esetén. A szoba-hőmérsékleten besugárzott minták csak egy részét érte a sugárzás. Jól látható, hogy ezeken a részekben a kiválások feloldódtak.



11. ábra. Ni_3Al kiválások feloldódása Ni—Al ötvözetben sugárzás hatására. A minta felső részén, amelyet nem ért sugárzás, a kiválások megmaradtak (a) világos, b) sötét látótér).

A sugárzás ötvözetekre gyakorolt hatásának leírására ma még nincs megbízható elméleti háttér. A megfigyelhető jelenségek oka kvalitatíve nyilvánvalóan az, hogy a lokális elmozdulás kaszkádok környezetében a szilárdoldat állapot instabillá válhat, ill. elmozdulás kaszkád egy meglevő kiválásban is létrejöhet. Ez utóbbi esetben a kiválás környezetében az ötvöző atomok feldúsulnak, amely feldúsulás részben a mátrix irányába történő diffúzióval szűnik meg, növelve ezzel a mátrix koncentrációját és megváltoztatva a kiválás tulajdonságait.

Egy kiválásokat és oldott atomokat tartalmazó ötvözetben mindig dinamikus egyensúly áll fenn. A kiválás határfelületéről termikus aktiválással ötvöző atomok leszakadhatnak (hasonlóan egy üreg határfelületéről történő vakancia emisszióhoz), növelve a mátrix oldott atom koncentrációját. Ugyanakkor a mátrixból oldott ato-

mok diffundálnak a kiválás határfelületéhez és beépülhetnek a kiválásba. E két folyamat egyensúlya szabja meg a kiválások méretét és eloszlását.

A sugárzás a pont hibák keletkezése és a megnövekedett diffúzió révén ezt az egyensúlyt változtatja meg. Hatására megváltozik a kiválás felületéről eltávozó atomok száma, ill. a felülethez érkező és a kiválásba beépülő atomok száma. Az új egyensúlyt a megváltozott feltételek szabják meg. Az új egyensúlyi állapotot a következő modell alapján becsülhetjük meg.

Tegyük fel, hogy az egyensúlyi állapothoz tartozik egy C oldott atom koncentráció, amely részben a mátrixban, részben a kiválásokban van jelen. Legyenek a kiválások gömbalakúak, r sugárral és legyen a térfogategységenkénti számuk n . Jelöljük a kiválások térfogategységében levő oldott atomok hányadát p -vel, a mátrix koncentrációját c -vel, akkor nyilvánvaló, hogy

$$C = \frac{4\pi}{3} r^3 pn + c. \quad (38)$$

Ha egy kiválás térfogata V , az időegységenként beépülő oldott atomok száma (29)-hez hasonló összefüggéssel adható meg [79]:

$$p \left(\frac{dV}{dt} \right)_+ = 3 D_{\text{eff}} \cdot cr. \quad (39)$$

A sugárzás hatására bekövetkező térfogatcsökkenés (a kiválást elhagyó atomok száma) arányosnak vehető az időegységenként keltett hibák K számával és a kiválás egy meghatározott vastagságú felületi rétegével, így [77]:

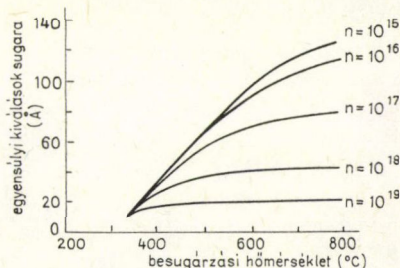
$$\left(\frac{dV}{dt} \right)_- = -4\pi r^2 \alpha K, \quad (40)$$

ahol α a rétegvastagságot jellemző arányossági tényező. Ez utóbbi két egyenletből (38) felhasználásával a kiválások sugarának időbeni változására a következő egyenletet kapjuk [77, 80]:

$$\frac{dr}{dt} = -\alpha K + \frac{3D_{\text{eff}} \cdot c}{4\pi pr} - D_{\text{eff}} nr^2. \quad (41)$$

A 12. ábra mutatja az egyensúlyi $r(T)$ összefüggést Ni—Al ötvözetre $C=0,135$ és $\alpha=10^{-6}$ cm esetén [18]. Látható, hogy az egyensúlyi sugár nagyon erősen függ a térfogategységenkénti kiválások számától. Ez utóbbi a nukleációs mechanizmus függvénye, amiről jelenleg keveset tudunk. A megfigyelések azt mutatják, hogy a besugárzott anyagban általában finom, diszperz eloszlású kiválások keletkeznek [77].

Alkalmos feltételek mellett (41) jobb oldala negatív is lehet, ami azt jelenti, hogy a kiválások átlagos sugara csökken, vagyis a kiválások egy része feloldódik. Az ilyen folyamatok tárgyalásához n időbeni változását is figyelembe



12. ábra. Kiválások egyensúlyi sugara Ni—Al ötvözetben a hőmérséklet függvényében

kell venni. Pontosabb elméleti megfontolásokban jelentős szerepe lehet a kiválások méreteloszlásának is. A sugárzás ötvözetekre való hatására az eddigiekben viszonylag kevés kísérleti vizsgálat született [22, 77, 78, 81], s ezek eredményei nem mindig egyértelműek [80].

Az oldott atomok szegregációjára *Johnson és Lam* [82] dolgozott ki elméletet, amit később többen továbbfejlesztettek. Az elmélet szerint a besugárzott anyagokban a szegregáció a rácshiba-oldott atom komplexek mozgása és az inverz Kirkendall-effektus következtében jön létre.

A Kirkendall-effektusnál a koncentráció gradiens hatására vakancia áramlás alakul ki. Besugárzáskor ennek a fordítottja jön létre a nyelők közelében, ahol a vakancia vagy intersticiális koncentráció gradiens a kezdetben homogén ötvözetben oldott atom vagy mátrix atom áramot hozhat létre. Pl. egy kétkomponensű ötvözetben az I_v vakanciaárammal szemben $I_v = -(I_A^v + I_B^v)$ atom áram indul meg, ahol A, B az ötvözet két komponense. A két áram aránya

$$\frac{I_A^v}{I_B^v} = \frac{c_A D_A^v}{c_B D_B^v},$$

amiből kitűnik, hogy a nyelő környezetében csökken a gyorsabban diffundáló atom koncentrációja. Intersticiális nyelő esetén $I_i = I_A^i + I_B^i$, és ha $D_A^i \neq D_B^i$, akkor a gyorsabban diffundáló atom feldúsul a nyelő közelében. Könnyen belátható, hogy az A atom

$$\frac{D_A^v}{D_B^v} > \frac{D_A^i}{D_B^i}$$

esetén feldúsul, ellenkező esetben elszegényedik a nyelő közelében. Az inverz Kirkendall-effektussal akkor jön létre a legnagyobb feldúsulás, ha az A atomok csak intersticiális mechanizmussal, a B atomok csak vakancia mechanizmussal diffundálnak.

Ugyancsak a nyelők körüli szegregációhoz vezet, ha az oldott atomok a vakanciákkal vagy saját intersticiálisokkal mozgékony komplex hibákat alkotnak. Ha ezek élettartama elég nagy, akkor a nyelők felé diffundálva valamelyik összetevő feldúsulását eredményezhetik. Magas hőmérsékleten a fordított Kirkendall-effektuson, alacsony hőmérsékleten a komplex hibák diffúzióján alapuló mechanizmus a hatékonyabb.

A kísérleti eredményekből kitűnik, hogy a sugárzással kiváltott szegregáció gyakran vezet nemegyensúlyi fázisok kiválására az üregek, diszlokációhurkok, szemcsehatárok közelében. Hatására megváltozik a kiválások térbeli eloszlása és morfológiája, a nyelökhöz közel és távol különböző fázisok stabilizálódhatnak stb.

Az elmélet kvalitatíve jól írja le a mátrix atomnál kisebb és nagyobb méretű atomok szegregációját. Így pl. a kétalkotós Ni ötvözetekben a nyelők közelében a nagy méretű Ti, Mo, Al, Cr és Mn atomok koncentrációja csökken, a kis méretű Si és Be atomoké nő. Jelenleg még nagyon kevés ismerettel rendelkezünk a komplex hibák kötési energiájára és diffúziójára vonatkozóan, ezért a szegregációs folyamatok mennyiségi leírására még nincs lehetőség. A területről jó áttekintést ad egy közelmúltban tartott konferencia anyaga [83].

6. A sugárzási károsodás hatása a mechanikai tulajdonságokra

A besugárzott anyagban keletkező hibák megváltoztatják az anyag fizikai tulajdonságait. A legjelentősebb változás az anyag mechanikai tulajdonságaiban lép fel, amelynek ismerete elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt alapvetően fontos.

A kristályos szerkezetű fémek képlékeny alakváltozása kivételes körülményektől eltekintve (ikresedés, diffúziós kúszás) diszlokációk csúszó mozgása által megy végbe [62]. A sugárzás hatására keletkező hibák a diszlokációk mozgását jelentősen megváltoztatják, sőt új alakváltozási mechanizmusok is kialakulhatnak. A sugárzás mechanikai tulajdonságokra vonatkozó hatását különböző módszerekkel vizsgálhatjuk. Az egyik esetben az előzetes besugárzás során keletkező hibákat tartalmazó anyagot terheljük meg és vizsgáljuk a képlékenységi tulajdonságokban megjelenő változásokat a besugárzás előtti állapothoz képest. Ilyenkor általában azt tapasztaljuk, hogy az anyag megkeményedik (folyáshatára és szakítószilárdsága megnő), az alakíthatósága (a törésig elérhető képlékeny alakváltozása) pedig lecsökken. Ezt a jelenséget sugárzási keményedésnek (ridegedésnek) nevezzük.

A másik esetben a sugárzásnak kitett anyagot egyidejűleg a folyáshatárnál kisebb mechanikai terhelésnek is alávetjük. Az ilyenkor létrejövő alakváltozást sugárzási kúszásnak nevezzük. Nyilvánvaló, hogy ennek a jelenségnek az ismerete elengedhetetlen a reaktor szerkezeti anyagok biztonságos tervezéséhez és felhasználásához, mert ezek a sugárzással egyidejűleg elkerülhetetlen mechanikai terhelés alatt állnak.

A következőkben áttekintjük a két jelenségek alapvető sajátosságait.

6.1. Sugárzási keményedés

6.1.1. Kísérleti eredmények

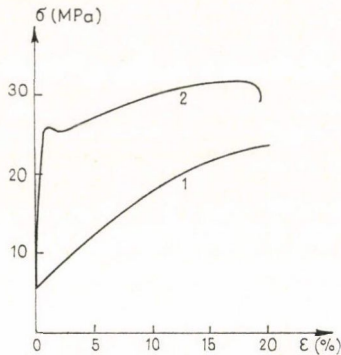
A besugárzott anyagban a sugárzás körülményeitől és dózistól függő mértékben keletkező hibák rugalmas feszültségterükön keresztül kölcsönhatásba lépnek a diszlokációkkal és akadályozzák mozgásukat. A sokféle hiba együttes hatására a folyáshatár jelentősen megnő a sugárzás előtti állapothoz képest. Jellegzetes feszültség-deformáció görbék mutat polikristályos rézre [84] a 13. ábra. Látható, hogy a folyáshatárhoz képest a szakítószilárdság csak kisebb mértékben növekszik. Ugyanakkor az alakítási keményedés $d\sigma/de$ sebessége és az alakíthatóság lecsökken. A besugárzott mintákon megjelenő kettős folyáshatár a kezdeti diszlokációkhoz kötődő ponthiba „felhő” következménye. Ennek rögzítő hatása elegendően alacsony hőmérsékleten olyan nagy lehet, hogy megakadályozza az előzetesen alakított anyagban kialakuló diszlokációs szerkezet relaxációját a terhelés megszüntetésekor. Ezért a besugárzás felhasználható az alakított anyag diszlokációs szerkezetének rögzítésére [85].

A sugárzási károsodás hatására fellépő folyáshatár növekedés növekvő dózissal nő. Erre mutat példát rozsdamentes acél esetén a 14. ábra [86].

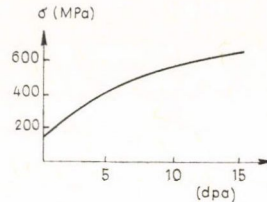
A sugárzási károsodás hatását jelentősen befolyásolja az anyag előléte és a besugárzás hőmérséklete. A 15. és 16. ábra hőkezelt és előzetesen 20%-ig hidegen alakított rozsdamentes acél próbatestek folyáshatárát és alakíthatóságát mutatja a besugárzás hőmérsékletének függvényében [30]. Látható, hogy mindkét paraméter

jelentősen különbözik a hőkezelt és az alakított minták esetén a különböző besugárzási hőmérsékleteken.

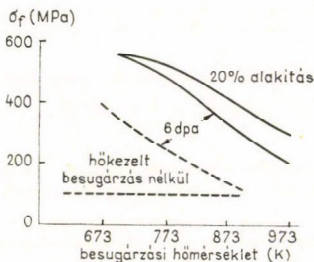
A bemutatott példákban világosan kitűnik, hogy a besugárzás hatására a fémek képlékenységi tulajdonságai jelentősen megváltoznak. Az elmúlt mintegy két évtized



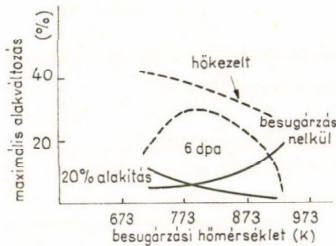
13. ábra. Polikristályos réz nyújtási feszültség-deformáció görbéje neutron besugárzás előtt 1. és után 2.
A sugárzás dózisa $\sim 0,06$ dpa



14. ábra. Neutronokkal besugárzott rozsdamentes acél folyáshatár növekedése a dózis függvényében



15. ábra. 6 dpa besugárzás hatására fellépő folyáshatár változás hőkezelt és alakított rozsdamentes acélban a besugárzási hőmérséklet függvényében



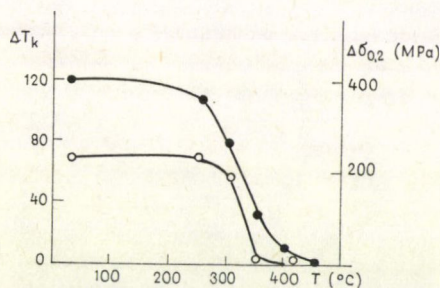
16. ábra. Ugyanaz mint 15. ábra az alakíthatóság esetén

során nagy számú vizsgálatot végeztek az előzetesen besugárzott fémek mechanikai tulajdonságaira vonatkozóan, elsősorban a reaktor szerkezeti anyagokként felhasznált rozsdamentes acélokon [87].

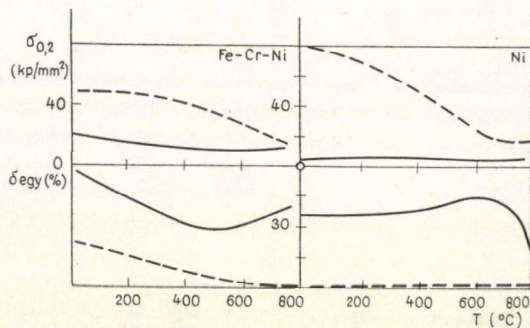
Az általános kísérleti tapasztalatok szerint az előzetes besugárzás hatása a folyáshatár megnövekedésében és az alakíthatóság lecsökkenésében jelentkezik. Általában teljesül az a szabály, hogy a folyáshatár megnövekedése együttjár az alakíthatóság lecsökkenésével, míg fordított irányban ez nem mindig igaz. Tulajdonképpen két jól elkülöníthető jelenségkör tartozik ide, amit az irodalomban alacsony hőmérsékleti sugárzási ridegedésnek (low-temperature radiation embrittlement, LTRE), ill. magas hőmérsékleti sugárzási ridegedésnek (high-temperature radiation embrittlement, HTRE) neveznek.

A LTRE elsősorban a tck fémekre és ötvözetekre jellemző, amelyekben egy meghatározott hőmérséklettartományban besugárzás nélkül is jellegzetes átmenet figyelhető meg a ridegtörés és a szívós törés között. Általában nyilvánvaló korreláció áll fenn a keményedés és a ridegedés között: hasonló módon függnek a besugárzás dózistól és hőmérsékletétől és a besugárzás utáni hőkezeléstől és $0,5T_m$ alatti hőkezeléssel megszüntethetők (17. ábra). Ötvözőelemekkel lényegesen módosítható a változások nagysága és a hőmérséklettartomány is. A felsorolt jellegzetességekből arra lehet következtetni, hogy a jelenséget a besugárzás következtében kialakuló pont hibák és hiba csoportok okozzák, amik erősen fékezik a diszlokációk mozgását. A besugárzás hőmérsékletével és az azt követő hőkezeléssel, valamint ötvözőelemekkel módosítani lehet a hiba csoportok szerkezetét és koncentrációját. Ennek az elképzelésnek az alapján a LTRE főbb vonásai jól értelmezhetők, de a jelenséget okozó rács hibák szerkezete és tulajdonságai tekintetében még nem alakult ki minden esetben egységes álláspont [30, 87, 88a].

A HTRE nikkel- és rézötvözetekben, ferrit- és ausztenitacéloknak, alumíniumban és egyéb anyagokban figyelhető meg. A jelenség $0,5T_m$ felett lép fel és lényeges vonása, hogy míg a felsorolt anyagok szilárdsági tulajdonságai a besugárzás utáni hőkezeléssel visszaállíthatók, addig a képlékenység csökkenése irreverzibilis (18. ábra) [88b], ellentétben a LTRE esetével. HTRE csak polikristályos anyagokon



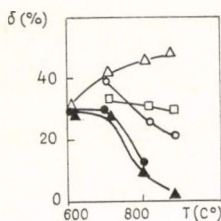
17. ábra. A hőkezelés hatása vas folyáshatárának (○) és ΔT_k ridegtörési hőmérsékletének (●) változására. Besugárzás 50°C -on $5 \cdot 10^{19} \text{ n/cm}^2$ dózissal



18. ábra. Fe—Cr—Ni acél és Ni mechanikai tulajdonságainak változása a hőkezeléssel besugárzás előtt (——) és után (— —) $9,8 \cdot 10^{21} \text{ n/cm}^2$, 70°C -on

tapasztalható, és csak a dózis egy küszöbértéke felett lép fel, ami anyagi minőségtől függően 10^{17} – 10^{21} n/cm^2 között változhat. A HTRE hőmérsékletfüggése kis dózisok esetében meglehetősen bonyolult, a dózis növelésével azonban egyre inkább hőmérsékletfüggetlenné válik. A kísérleti tapasztalatok szerint a He koncentráció növekedésével a HTRE erősödik (19. ábra) [88c].

A különböző kutatók véleménye megegyezik abban, hogy a HTRE oka a szemcsehatárok szilárdságának csökkenése a besugárzás hatására. Az elektronmikroszkópos vizsgálatok szerint a szemcsehatárok aktív szerepet játszanak a diszlokációk keltésében, szerkezetük megváltozik és kialakul közöttük egy közel hibamentes tartomány. Mindezek hozzájárulnak ahhoz, hogy a törés a szemcsehatárokon mentén indul meg. Ebben döntő szerepe van a szemcsehatárokon a besugárzás ha-



19. ábra. Fe—Ni—Mn acél relatív nyúlása a hőmérséklet és a He koncentráció függvényében (\triangle $C_{\text{He}}=0$; \square $2 \cdot 10^{-5}$ at%, \circ $2 \cdot 10^{-4}$ at%, \bullet $2 \cdot 10^{-3}$ at%, \blacktriangle $2 \cdot 10^{-2}$ at%)

tására kialakuló szegregációknak [88b]. A szemcsehatárok meggyengülését kiválthatják az ott kialakuló He buborékok is. Ugyancsak nem elhanyagolható tényező, hogy egyidejűleg a szemcsékben a He hatására lefékeződik a poligonizáció és az újrakristályosodás, és a szemcsék felkeményed-

nek. Ez a folyamat szintén elősegíti a szemcsehatár törés kialakulását.

Mint már említettük, az általános kísérleti tapasztalatok szerint az előzetes besugárzás hatása kivételes esetektől eltekintve, mindig a folyáshatár megnövekedésében és az alakíthatóság lecsökkenésében jelentkezik. Az észlelt hatásokhoz kapcsolódó mechanizmusok azonban jelentősen különböznek a besugárzás T_B hőmérsékletétől függően. Ha $T_B \lesssim 0,35 T_m$, akkor — amint az előzőekben láttuk —, a keletkező hibák elsősorban ponthibák, ill. ezek komplexei és diszlokációhurkok. Ezek a diszlokációk mozgását jelentősen akadályozzák és ez eredményezi a folyáshatár növekedést. Ha $0,35 T_m \lesssim T_B \lesssim 0,57 T_m$, akkor a diszlokáció mozgást megváltoztató hibák diszlokációhurkok, üregek, buborékok, ill. ötvözetek esetén az új méretű és eloszlású kiválások. Az említett esetek általános jellemzője, hogy a törés mechanizmusában nem lép fel lényeges változás a sugárzásmentes anyaghoz képest.

A $T_B \gtrsim 0,57 T_m$ hőmérsékleteken történő besugárzáskor azonban az anyagok töréssel szembeni ellenállása is lecsökken. Ez a magas hőmérsékleten jelentkező sugárzási ridegedés, amelyet az előzőekben tárgyaltunk és amely a szemcsehatárok menti törésre vezet [87, 88].

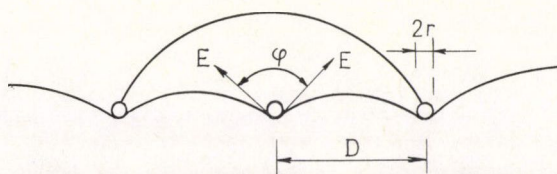
A következőkben röviden áttekintjük a kísérleti eredmények értelmezésével kapcsolatos elméleti kérdéseket.

6.1.2. A folyáshatár elmélete

A sugárzási károsodás során keletkező különböző kristályhibák az egyes csúszósíkokban a diszlokációk mozgásával szemben különböző erősségű akadályokat képeznek. A folyáshatár az a külső feszültség, amelynek hatására a diszlokációk nagy távolságokra elmozgathatók az akadályok sokaságán keresztül. A kérdéses külső feszültség helyett elméletileg azt a kritikus csúsztató feszültséget fogjuk meghatározni, amely egy adott csúszósíkban kell, hogy működjön ahhoz, hogy a szükséges diszlokáció mozgás bekövetkezzen. Ez a kritikus csúsztató feszültség egyértelmű kapcsolatba hozható a külső feszültséggel, mind egykristályok, mind polikristályok esetén [85].

A diszlokációk akadályokon való áthaladásának mechanizmusa függ az akadály erősségétől. Ha a diszlokáció átvágja az akadályt mozgása során, akkor átvágásos mechanizmusról beszélünk [89], míg a diszlokáció mozgás merevnek tekinthető akadályok esetén az Orowan mechanizmussal valósul meg [90]. Ezeknek a folyamatoknak a természetét ma már elég jól ismerjük, mert a kiválóan keményedő ötvözetekben is hasonló mechanizmusok működnek [91—96].

A különböző akadályok hatására fellépő folyáshatár növekedést a következőképpen határozhatjuk meg. Tegyük fel, hogy egy diszlokáció mozog a csúszósíkban τb hosszegységenkénti erő hatása alatt (τ a csúszósíkban a csúszás irányában



20. ábra. Diszlokáció kihajlása akadályok között

ható feszültség, b a Burgers vektor). Egy akadály elé érkezte megtorpan és kihajlik az akadályok között (20. ábra). Ha az akadály két oldalán elhelyezkedő diszlokációs szakaszok φ szöget zárnak be egymással, akkor az akadályra a diszlokáció

$$F(\tau) = 2E \cos \frac{\varphi}{2} \quad (42)$$

erőt gyakorol, ahol E a diszlokáció vonalmenti feszültsége [62]. Ez az erő a τ csúsztató feszültség hatására jön létre, amely a diszlokációt kihajlítja mindaddig, amíg a vonalmenti feszültségből származó visszatérítő erő egyensúlyt nem tart a csúsztató τ feszültséggel a kihajlás mértéke, s ezzel együtt az akadályra ható erő nő. Legyen az akadály erőssége (az a maximális erő, amellyel a diszlokáció mozgását akadályozni képes) F_m és φ^* az a szög, amelynek elérésekor az akadály két oldalán kihajló diszlokációs szakaszok az akadályt körülölelő diszlokációhurokot képezve egyesülnek. Ebben az esetben egy Orowan hurok keletkezik, amelynek hátrahagyásával a diszlokáció továbbhalad. Ha

$$F_m < 2E \cos \frac{\varphi^*}{2}, \quad (43)$$

akkor a diszlokáció egy $\varphi_c < \varphi^*$ szöghöz tartozó kihajlásnál átvágja az akadályt.

Az átvágásos vagy kihajlásos mechanizmus beindulásához szükséges csúsztató feszültség kiszámításához a kritikus kihajláshoz tartozó φ_c , ill. φ^* szögeket kell meghatároznunk. A számítások részleteivel itt nem foglalkozunk. Megmutatható, hogy az Orowan mechanizmus működése olyan akadályok esetén indul be, amelyekre $F_m > 0,5\mu b^2$, ahol μ a nyírási modulusz. Ebben az esetben a kritikus csúsztató feszültség a következő kifejezéssel adható meg [91]:

$$\tau_c^0 \cong 0,17 \mu \frac{b \ln \frac{r}{r_0}}{D - r}, \quad (44)$$

ahol r az akadályok átlagos sugara és r_0 a diszlokáció üreg sugara. Amint ez várható volt, az Orowan mechanizmus működéséhez szükséges feszültség nem függ az akadály erősségétől.

Az átvágásos mechanizmus esetén a kritikus csúsztató feszültség [91]:

$$\tau_c = \frac{F_m^{3/2}}{\sqrt{2} E^{1/2} D b}, \quad (45)$$

ahol az F_m akadály erőssége a diszlokáció és az akadály kölcsönhatásától függ. A besugárzáskor keletkező hibák erősségét a 4. táblázatban foglaltuk össze [97].

6.1.3. Az Orowan mechanizmus

A 4. táblázatból kitűnik, hogy a nagy méretű diszlokációhurkok, valamint az üregek és buborékok jelentenek átvághatatlan akadályokat a diszlokációk számára.

4. TÁBLÁZAT

A besugárzáskor keletkező hibák erőssége [97]

$F_m < 0,25\mu b^2$	$0,25\mu b^2 < F_m < 0,5\mu b^2$	$F_m > 0,5\mu b^2$
Diszlokáció-metszés	Kisméretű prizmatikus diszlokációhurkok	Nagyobb méretű diszlokáció hurkok, pl. Frank diszlokáció,
Ponthibák és ponthibacsoportok fck fémekben	Intersticiálisok tck fémekben	$b = \frac{a}{2}$ [111]
	Koherens kiválások	Üregek és buborékok
		Inkoherens kiválások

Ezek jelentősebb számban nagy dózisoknál és a $0,3T_m < T_B < 0,57T_m$ besugárzási hőmérsékleteken keletkeznek, tehát az Orowan mechanizmus működése ilyen esetekben várható.

Felhasználva a 7b. ábra adatait kb. 10 dpa-nál ($N_l \sim 10^{15}/\text{cm}^3$, $\varrho_d \sim 10^{10}/\text{cm}^2$), megbecsülhetjük a diszlokáció hurkoktól származó folyáshatár növekedést. A $\varrho_d = 2\pi r_l N_l$ összefüggésből $r_l \approx 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ cm} \sim 50b$ adódik, továbbá $D \approx N_l^{-1/3}$. Ezekkel az értékekkel (44)-ből kapjuk, hogy $\tau_c \sim 2 \cdot 10^{-3} \mu$. Ez a durva becslés kvalitatíve jól egyezik a 15. ábrán megadott folyáshatár növekedéssel. A 7b. ábra szerint 10 dpa körül az üregek száma még viszonylag kicsi.

Az üregektől származó hatást célszerű kifejezni a térfogategységben levő üregek nagyságával, más szóval térfogati hányadával, S -sel, amelyet a 3.2.3. pontban tárgyaltunk. Felhasználva még az átlagos üregsugárt, (44) a következő alakba írható át (most $r = \frac{r_c \pi}{2}$) [91, 95]:

$$\tau_c^s = 0,12 \mu \frac{\sqrt{S} b \ln \frac{\pi r_c}{2r_o}}{\left(1 - \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{S}{2}}\right) r_c}. \quad (46)$$

Eredményünk azt jelenti, hogy csak az üregeket számba véve, a folyáshatár növekedés közelítőleg arányos az üreg térfogati hányad négyzetgyökével. Az $S = 0,02$ és $N_0 = 10^{14}/\text{cm}^3$ értékekkel $r_c \sim 3,6 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$ -nek adódik, ami jól összevethető a 10. ábra adataival. A kapott értékek felhasználásával (46)-ból $\tau_c^s \sim 8 \cdot 10^{-4} \mu$ adódik, ami ismét egyezik kvalitatíve a kísérleti adatokkal.

A nagy dózisoknál fellépő teljes folyáshatár növekedés értelmezéséhez a diszlokációhurkoktól és üregektől (buborékoktól) származó hatást együttesen kell

számba vennünk. Nem világos azonban jelenleg, hogy az egyes járulékok additívak-e vagy nem. Újabban egyes szerzők szerint realisabb eredményt kapunk, ha a különböző járulékok négyzetösszegéből vont négyzetgyökkel adjuk meg az eredő folyáshatárt [98]. Az ilyen jellegű kérdések pontos vizsgálatához részletes kísérleti adatok ismeretére lenne szükség, a (44, 46) kifejezések valamennyi paraméterére vonatkozóan. Az előbbiekből kitűnik azonban, hogy az Orowan mechanizmusra vezető hibák hatásának értelmezéséhez szükséges elvi háttérrel már rendelkezünk.

Kevésbé világosak az alacsony hőmérsékleteken és kis dózisonál kialakuló, átvágható hibák tulajdonságaival kapcsolatos kérdések.

6.1.4. Az átvágásos mechanizmus

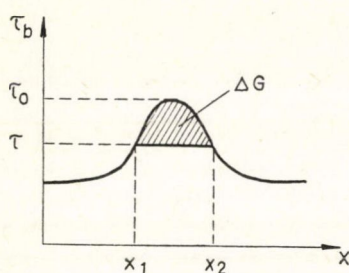
A 4. táblázat első két oszlopában szereplő átvágható akadályok alacsony hőmérsékleti ($T_B < 0,3T_m$) besugárzás után dominálnak a folyáshatár növekedésben. Ennek meghatározásakor általában figyelembe kell vennünk azonban termikusan aktivált folyamatokat is. Az Orowan mechanizmus nem aktiválható termikusan, mert a diszlokáció akadályon való áthaladása viszonylag nagy térfogatban végbe menő diszlokáció mozgással valósul meg. Az átvágási folyamat megindulásához azonban a diszlokáció és az akadály lokális kölcsönhatásából származó munkavégzésre van szükség, amelyhez a csúsztató feszültség munkáján kívül a termikus energia fluktuációk is jelentősen hozzájárulhatnak.

Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a besugárzás után az alakítás hőmérséklete olyan alacsony, hogy a termikus aktiválás hatása elhanyagolható. Tegyük fel, hogy a besugárzás során keletkező diszlokációhurkok száma már olyan nagy, hogy összefüggő diszlokációhálót képeznek. Ha a hurkok száma N_l és átlagos átmérőjük $2r_l = d_l$, akkor a hurkoknak megfelelő diszlokációsűrűség $\varrho_l = N_l \pi d_l$. A csúszó diszlokációknak ezen hálón keresztül kell mozogniuk, amelyben az akadályt képező diszlokációk átlagos távolsága $D = \varrho_l^{-1/2} = (N_l \pi d_l)^{-1/2}$. Tegyük fel, hogy egy hálódiszlokáció erőssége, $F_m = 0,25 \mu b^2$ (4. táblázat). Felhasználva még az $E \cong \cong 1/2 \mu b^2$ közelítést, (45)-ből a folyáshatár növekedésre a következő kifejezést kapjuk:

$$\tau_c = \frac{\sqrt{\pi}}{8} \mu b \sqrt{N_l \cdot d_l}. \quad (47)$$

Eredményünk csekély számfaktorbeli eltéréssel megegyezik Foreman számítógépes szimulációval kapott kifejezésével [99]. Ha $\varrho_l \sim 6 \cdot 10^{10}/\text{cm}^2$, akkor $\tau_c \sim 10^{-3} \mu$, ami ismét összevethető a kísérleti tapasztalatokkal.

A (47) összefüggés viszonylag nagy dózisonál érvényes, amikor a diszlokációhurkok már összefüggő hálót képeznek. Lényegesen kisebb dózisonál is, amikor diszlokációhurkokkal még nem kell számolnunk, megfigyelhető azonban jelentős keményedés. Ez annak a következménye, hogy az elmozdulás kaszkádok centrumában egy atomokban elszegényedett zóna alakul ki [100], amely a mozgó diszlokáció számára átvágható akadályt jelent. Seeger számításai szerint [100] ez a hatás a sugárzás dózisának és így időtartamának a négyzetgyökével arányos folyáshatár növekedést eredményez, ami jól egyezik a kísérleti tapasztalattal. Ez utóbbi természetesen csak viszonylag rövid besugárzási időtartamokra vonatkozik, amelyen belül más kiterjedt hibák keletkezésével nem kell számolnunk.



21. ábra. Az akadály-diszlokáció kölcsönhatás profilja

A termikus aktiválás hatását a következőképpen vehetjük figyelembe. Ha $T \neq 0$ K-en a csúsztató feszültség, $\tau < \tau_c$, akkor a diszlokáció akadályon való áthaladásához (az x_1 -ről az x_2 helyre való eljutáshoz) a következő szabadentalpia befektetés szükséges [101, 102]:

$$\Delta G = Db \int_{x_1}^{x_2} (\tau_c - \tau) dx. \quad (48)$$

Az integrál értéke erősen függ az akadály és diszlokáció kölcsönhatását jellemző feszültség-távolság profiltól (23. ábra). Ha ΔG -t a diszlokáció mozgás aktiválási energiájának tekintjük, akkor a deformáció sebessége:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \cdot e^{-\frac{\Delta G}{kT}}, \quad (49)$$

ahol $\dot{\epsilon}_0$ állandó, amely függhet a τ feszültségtől.

Ha a derékszögű kölcsönhatási profilt tételezünk fel, akkor a (48) egyenletből

$$\Delta G = \Delta F_0 \left(1 - \frac{\tau}{\tau_c} \right), \quad (50)$$

ahol $\Delta F_0 = Db\tau_c(x_2 - x_1)$. Ezt a (49) összefüggésbe behelyettesítve adott deformáció sebességénél lineáris összefüggés adódik a folyáshatár és a hőmérséklet között, a folyáshatár a hőmérséklet növelésével csökken.

A kísérleti vizsgálatok szerint azonban a $\tau(T)$ összefüggés általában nem lineáris. Ez azt jelenti, hogy a diszlokáció akadály kölcsönhatási profil bonyolultabb a derékszögűnél. Mivel a profil alakja általában nem ismert, ezért a kísérleti eredményeket (50) empirikusan általánosított formájával szokták összevetni, amely a következő [101]:

$$\Delta G = \Delta F_0 \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_c} \right)^p \right]^q, \quad (51)$$

ahol

$$0 \leq p \leq 1 \quad \text{és} \quad 1 \leq q \leq 2.$$

Az eddig ismert elméletek is az (51)-nek megfelelő $\tau(T)$ összefüggésre vezettek. Pl. az elszegényedett zónák hatását leíró Seeger elméletben $p=2/3$ és $q=3/2$ [100].

6.2. Sugárzási kúszás

Sugárzási kúszásnak nevezzük azt az időfüggő maradó alakváltozást, amely egyidejű terhelés és besugárzás hatására jön létre. A besugárzott anyagokban kialakuló folyamatok közül jelenleg talán ez a legkevésbé megértett, annak ellenére, hogy a szerepe alapvetően fontos a reaktor szerkezeti anyagok tervezésében.

A megértést az teszi rendkívül nehézé, hogy a sugárzási kúszással egyidejűleg a sugárzástól független kúszási mechanizmusok is működhetnek [103–105], továbbá olyan folyamatok is végbemehetnek, mint pl. az üregképződés, amely szín-

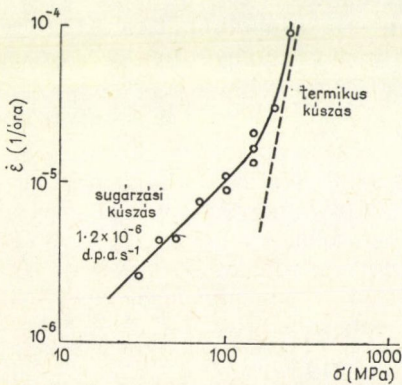
tén az anyag méretváltozását eredményezi. Jelentős nehézségeket okoz a pontos kísérleti feltételek megvalósítása is, mind reaktorban elhelyezett próbatesteknél, mind egyéb sugárforrást alkalmazó vizsgálatok esetén [106].

6.2.1. Kísérleti eredmények

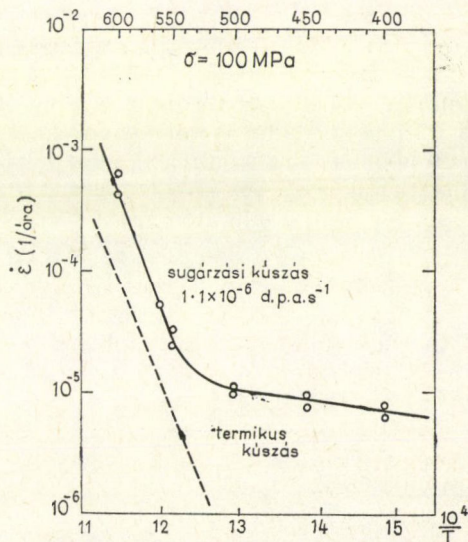
Az elmúlt tíz év alatt nagy számú kísérleti vizsgálatot végeztek a sugárzási kúszásra vonatkozóan. Ezek legnagyobb része rozsdamentes acélon történt, amit az indokol, hogy sokféle összetételű acélokat alkalmaznak reaktor szerkezeti elemként [106]. Az eddigi vizsgálatok eredményeinek összehasonlítása általában rendkívül nehéz, mert a kísérleti körülményekben (az alkalmazott sugárzás fajtája, fluxusa és dózisa, a próbatest feszültség állapota, az alakváltozás indikálási, ill. mérési módszere stb.) lényeges különbségek vannak. Ezért a következőkben nem törekszünk teljességre, hanem csak néhány jellegzetes példát mutatunk be.

Viszonylag kevés kísérleti vizsgálat született reaktorokban elhelyezett próbatesteken. Ennek oka elsősorban a kísérleti nehézségekkel és az eljárás drágaságával lehet kapcsolatos. Gyors reaktorban elhelyezett acél próbatesteken kúszásvizsgálatot először *Mosdale* és *munkatársai* végeztek [107, 108]. Eredményeik szerint a kúszás sebessége lineárisan nő a sugárzás fluxusával és a terheléssel, és független a hőmérséklettől az 550—770 K határok között. Ezeket az eredményeket további vizsgálatok is megerősítették [106].

Mivel a reaktorokban történő kúszásvizsgálat nehézkes és drága, ezért az utóbbi években egyre több ilyen mérést végeznek a szimuláló besugárzások alkalmazásával [109—111]. Az ilyen kísérletekben a kúszási sebességet befolyásoló paramétereket pontosabban be lehet állítani és szélesebb határok között lehet változtatni.



22. ábra. Rozsdamentes acél kúszási sebességének feszültség függése 500 °C-on 4 MeV-es proton besugárzás alatt



23. ábra. Rozsdamentes acél kúszási sebességének hőmérséklet függése 100 MPa terhelésnél 4 MeV-es proton besugárzás alatt

A 22. és 23. ábrán 4 MeV-es protonokkal besugárzott acél kúszási sebességét láthatjuk a feszültség és a hőmérséklet függvényében [109]. Lényeges, hogy a lineáris feszültség függés nagyobb terheléseknél megszűnik, sőt más esetekben parabolikus összefüggést is észleltek [110].

A néhány bemutatott példából is kitűnik, hogy a jelenlegi kísérleti ismereteink nem tekinthetők egyértelműnek a sugárzási kúszás természetét illetően. Kis feszültségeknél a kúszás sebessége lineárisnak tekinthető, ami azért lényeges, mert erről az elméleti modelleknek számot kell adniuk. A következőkben röviden áttekintjük az eddig ismeretes mechanizmusokat, amelyek sugárzási kúszást eredményezhetnek.

6.2.2. A sugárzási kúszás mechanizmusai

Az elmúlt mintegy két és fél évtized alatt számos olyan modellt dolgoztak ki, amelyek lehetséges kúszási mechanizmusokkal kapcsolatosak. Valószínű, hogy az ismert modellek mindegyikének van valóságtartalma. Nehéz jelenleg megítélni a relatív fontosságukat, elsősorban az említett hiányos kísérleti adatok miatt. A jelenlegi ismeretek alapján úgy tűnik, hogy legalábbis kis feszültségeknél, az 5.2.1. pontban említett SIPA mechanizmus fontos szerepet játszik a sugárzási kúszásban.

6.2.2.1. SIPA mechanizmus

Legyen a besugárzott anyagban meghatározott diszlokáció szerkezet, amelyben az éldiszlokációk sűrűsége ϱ . Jelöljük ezekből a külső, egytengelyű feszültségre merőleges többlet félsíkú diszlokációk sűrűségét ϱ_{\perp} -sel, míg a párhuzamosakat ϱ_{\parallel} -sal (4. ábra). Az 5.1. pontban követett gondolatmenet szerint a merőleges diszlokációkon időegység alatt eltűnő intersticiális atomok és vakanciák számának különbsége

$$\frac{dN_{p\perp}}{dt} = \frac{V}{b^3} (D_i k_{i\perp}^2 c_i - D_v k_{v\perp}^2 c_v), \quad (52)$$

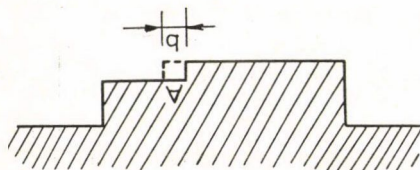
ahol V a próbatest térfogata és $1/b^3$ az egységnyi térfogatban levő atomok száma. Az 5.2.1. pont eredményei alapján $dN_{p\perp}/dt > 0$, vagyis az ilyen helyzetű diszlokációkhoz több intersticiális diffundál, mint vakancia. Ezért a feszültségre merőleges irányú többlet félsíkok időben növekedni fognak (24. ábra). Ha az ábrán mutatott A helyre beépül egy intersticiális atom, akkor a próbatest a feszültség irányában

$$\Delta \varepsilon = \frac{b^2}{q} \cdot \frac{b}{l} = \frac{b^3}{V} \quad (53)$$

relatív megnyúlást szenved, ahol q a próbatest feszültségre merőleges keresztmetszete, l a feszültségirányú hossza. (A próbatest relatív megnyúlása b/l lenne egy teljes keresztmetszeti új többlet félsík esetén.) Az időegységenkénti $\dot{\varepsilon}'_1$ relatív megnyúlást (52) és (53) szorzata adja, azaz

$$\dot{\varepsilon}'_1 = D_i k_{i\perp}^2 c_i - D_v k_{v\perp}^2 c_v. \quad (54)$$

A feszültséggel párhuzamos félsíkú diszlokációkon eltűnő ponthibákra (52)-



24. ábra. Egytengelyű feszültség irányára merőleges irányú éldiszlokáció többlet félsíkja (a diszlokáció „éle”)

vel analóg egyenletet írhatunk fel, amivel megkaphatjuk a feszültségre merőleges $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ alakváltozásokat (most $dN_{p\parallel}/dt < 0$, 5.2.1. pont). Feltéve, hogy a feszültségre merőleges irányokban az anyag izotrop:

$$\dot{\varepsilon}'_2 = \dot{\varepsilon}'_3 = D_i k_{i\parallel}^2 c_i - D_v k_{v\parallel}^2 c_v. \quad (55)$$

Az eddigiekben nem vettük figyelembe, hogy a sugárzás alatt általában üregképződés is van, amely izotrop térfogatváltozással jár. Legyen ennek a térfogatváltozásnak a sebessége \dot{S} , akkor egy adott irányban az ebből származó megnyúlás $\dot{S}/3$. Ezzel a feszültségirányú relatív méretváltozás eredő sebessége:

$$\dot{\varepsilon}_1 = \frac{1}{3} \dot{S} + D_i k_{i\perp}^2 c_i - D_v k_{v\perp}^2 c_v, \quad (56)$$

míg a teljes izotrop térfogatváltozás sebessége:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \dot{S} + \dot{\varepsilon}'_1 + \dot{\varepsilon}'_2 + \dot{\varepsilon}'_3. \quad (57)$$

Ezek felhasználásával megkaphatjuk a feszültségirányú tényleges kúszási (nem izotrop térfogatváltozásból származó) alakváltozást:

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_1 - \frac{1}{3V} \frac{dV}{dt} = \frac{2}{3} [D_i c_i (k_{i\perp}^2 - k_{i\parallel}^2) - D_v c_v (k_{v\perp}^2 - k_{v\parallel}^2)]. \quad (58)$$

Tegyük fel, hogy az éldiszlokációk irány szerinti eloszlása véletlenszerű, azaz az adott irányú éldiszlokáció sűrűsége $\varrho/3$. A (21), (22) kifejezések felhasználásával:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{2}{9} \varrho [(Z_{i\perp} - Z_{i\parallel}) D_i c_i - (Z_{v\perp} - Z_{v\parallel}) D_v c_v]. \quad (59)$$

Eredményünk szerint külső feszültség hatása alatt, a különböző helyzetű éldiszlokációk ponthibákkal való eltérő kölcsönhatása miatt, a besugárzás során folytonos kúszási alakváltozás megy végbe. A folyamat létezésére először *Wolfer és Ashkin* [112] mutatott rá, majd *Heald és Speight* végzett erre vonatkozó részletes vizsgálatokat [68, 113, 114].

Bullough és Willis számításai szerint [67] vakanciákra jó közelítéssel $Z_{v\perp} - Z_{v\parallel} \approx 0$. Ha elhanyagoljuk az intersticiális vakancia rekombinációt, akkor a (6) egyenletet egysúlyra felhasználva, (59) a következő alakban írható fel:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{2}{9} \varrho \frac{Z_{i\perp} - Z_{i\parallel}}{k_i^2} K, \quad (60)$$

azaz a kúszási sebesség arányos az időegység alatti ponthiba produkcióval. Az anizotrop kölcsönhatásra vonatkozó részletes számítások szerint [67] a $Z_{i\perp} - Z_{i\parallel}$ különbség a σ feszültséggel arányos. Ezt felhasználva a tiszta SIPA mechanizmusból származó kúszási sebesség [113]:

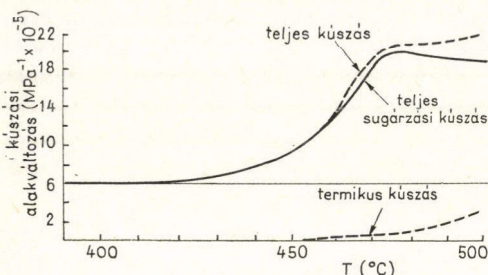
$$\dot{\varepsilon} = \frac{15}{32} \cdot \frac{K}{\mu} \cdot \frac{\sigma}{\varepsilon_i}, \quad (61)$$

ahol ε_i az intersticiális atomok méreteltérése. Eredményünk azt mutatja, hogy a

SIPA mechanizmus a kis feszültségeknél megfigyelt kísérleti eredményekkel összhangban van (nagyságrendje általában $\dot{\epsilon} < 10^{-6}/s$).

Bullough és Hayns kiterjesztette a számításokat arra az esetre is, amikor kitüntetett helyzetű vakanciahurkok is keletkeznek, figyelembe véve a hőmérséklet hatását is [26].

Eredményeiket a 25. ábra mutatja. Ebből kitűnik, hogy rozsdamentes acélban 400 és 500 °C között a sugárzási kúszás jelentősen megnövekszik a vakanciahurkok keletkezése miatt.



25. ábra. Elméleti kúszási deformáció a hőmérséklet függvényében, 10 dpa dózisonál és a következő paraméter értékek esetén: $\mu = 8 \cdot 10^4$ MPa, $\epsilon_i = 1$ [26].

környező szemcsékben olyan nagy feszültségek keletkeznek, amelyek képlékeny alakváltozást idéznek elő. A modell segítségével magyarázni lehet Zr ötvözetek sugárzási kúszásának időfüggését [106, 116].

6.2.2.2. Folyási mechanizmus

Az első lehetséges sugárzási kúszási mechanizmus gondolata *Roberts és Cottrell* munkájában merült fel [115]. Feltételezték, hogy a polikristályos anyagban egyes szemcsék a sugárzás hatására megnövekszenek és emiatt a

6.2.2.3. Intersticiális diszlokációhurok mechanizmus

A modell azon alapszik, hogy a sugárzás hatására, feszültség alatt álló anyagban keletkező intersticiális diszlokációhurokok irány szerinti eloszlása nem véletlenszerű, hanem a feszültségre merőleges kristálytani síkokban nagyobb valószínűséggel keletkeznek [117, 118]. *Brailsford és Bullough* számításai szerint ez a folyamat a következő kúszási sebességre vezet [46]:

$$\dot{\epsilon} = \frac{2}{3} \frac{b^3 n q_i}{k T Q_i} \cdot \sigma \dot{S}, \quad (62)$$

ahol $n \sim 10$, egy kritikus hurok méret eléréséhez szükséges intersticiális atomok száma, q_i a teljes diszlokáció koncentráció. Látható, hogy a kúszási sebesség arányos most is a feszültséggel, továbbá az üregektől származó térfogatnövekedés sebességével (ez utóbbi a tiszta SIPA mechanizmus esetén szintén érvényes.) Ez a mechanizmus valószínűleg csak kis dózisoknál jelentős, amikor a sugárzás hatására keletkező diszlokációk koncentrációja még kicsi [119].

6.2.2.4. Diszlokáció csúszás mechanizmus

Az előzőekben ismertetett modellekben az alakváltozás a diszlokációk kúszó mozgásának következménye. *Gittus* vetette fel azt a lehetőséget [120–122], hogy éppen ezen kúszó mozgás következtében kialakulhatnak olyan instabil diszlokáció konfigurációk, amikor egyes diszlokáció szakaszok a külső feszültség hatására csúszó-

mozgást végezhetnek. Ennek során a szomszédos diszlokációk kölcsönhatásából származó lokális nagy deformációk relaxálnak, majd a folyamat megismétlődik stb. A kúszás sebességére a következő összefüggés adódott:

$$\dot{\epsilon} = \frac{\sigma}{\sigma_f} \dot{S}, \quad (63)$$

ahol σ_f a folyáshatár.

A folyamatot megfigyelték nagy feszültségű elektronmikroszkópban és több kísérleti eredménnyel is jó egyezést adott.

6.2.3. Összefoglalás

Összefoglalva, az előzők alapján a sugárzási kúszás elméleti modelljeire vonatkozóan megállapítható, hogy számos további elméleti és főként kísérleti vizsgálatra van szükség ahhoz, hogy az egyes mechanizmusok valódi jelentőségét tisztázni lehessen. A feladat megoldása még számos nehézséget rejt magában, különösen az ötvöző atomok hatásával kapcsolatban. Nehéz problémát jelent az egyes mechanizmusok felismerése is. Mint láttuk, valamennyi eddig ismert sugárzási kúszási modellben az alakváltozás sebessége arányos a feszültséggel és az üregekkel kapcsolatos térfogatváltozás sebességével. Ezáltal még nagyon pontosan végrehajtott kísérleti eredményekből is nehéz a tényleges mechanizmust megállapítani. Ezt csak fokozza az a tény, hogy pl. rozsdamentes acél esetén a kúszási alakváltozás csak tört része a térfogatváltozásból származó méretváltozásnak ($\dot{S} \sim 10\dot{\epsilon}$ [123]). A feladat fontossága azonban kétségtelenné teszi, hogy az elkövetkezendő években e problémakör megértésében jelentős fejlődés fog bekövetkezni.

IRODALOM

1. P. D. Townsend, J. C. Kelly and N. E. W. Hartley: Ion Implantation, Sputtering and Their Application, Academic Press, New York, 1976.
2. J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott: Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat-Fys. Medd. 33. No. 14, 1963.
3. I. M. Torrens: Interatomic Potentials, Academic Press, New York, 1972.
4. J. Lindhard and M. Scharff: Phys. Rev. 124, 128, 1961.
5. M. D. Brown and C. D. Moak: Phys. Rev. B. 6, 90, 1972.
6. A. Kinchin and R. S. Pease: Rep. Progr. Phys. 18, 1, 1955.
7. M. T. Robinson and I. Torrens: Phys. Rev. B. 9, 5008, 1974.
8. A. Scholz and C. Lehmann: Phys. Rev. B. 6, 813, 1972.
9. W. Schilling and K. Sonnenberg: J. Phys. F., 3, 322, 1972.
10. N. L. Peterson and R. W. Siegel (eds): Properties of Atomic Defects in Metals, North Holland, Amsterdam, 1978.
11. D. W. Palmer, M. W. Thompson and P. D. Townsend (eds): Atomic Collision Phenomena in Solids, North-Holland, Amsterdam, 1970.
12. V. V. Kirsanov: Voproszű atomnoj nauki i tehniki, Szeria: Fizika radiacionüh povrazsgyenyij i radiacionnoje materialovogyenie, (Vűp) HFTI, AN, USZSZR, Harkov, 1978. p. 3.
13. D. A. Doran and R. A. Burnett: Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects, Eds. P. C. Gehlen et al., Plenum, New York, 1972. p. 403.
14. D. A. Doran: Nucl. Sci. Eng. 49, 130, 1972.
15. O. S. Oan: Cross Sections for Atomic Displacements in Solids by Fast Electrons, U. S. A. E. C. Report, ORNL-4897. 1973.
16. A. D. Marwick: J. Nucl. Mat. 55, 259, 1975.
17. A. D. Marwick: J. Nucl. Mat. 55, 355, 1975.

18. R. S. Nelson: *Contemp. Phys.* 19, 543, 1978.
19. R. Bullough, B. L. Eyre and K. Krishan: *Proc. Roy. Soc. A346*, 81, 1975.
20. A. D. Brailsford and R. Bullough: *J. Nucl. Mat.* 44, 121, 1972.
21. R. S. Nelson (ed.): *The Physics of Irradiation Produced Voids*, Harwell 9—11th Sept., AERE R7934 (HMSO), 1975.
22. T. H. Gould and D. H. Vincent: *Journ. de Physique*, 35, C6—315, 1974.
23. S. D. Harkness, C. W. Allen and T. Blewitt: *Reaktornoe materialovegyenie*, Tom 2., Moszkva, 1978. p. 247.
24. J. A. Spitznagel, F. W. Wiffen and F. V. Nolfi: *J. Nucl. Mat.* 85—86, 629, 1979.
25. B. L. Eyre, M. H. Loretto and R. E. Smallman: „Vacancies 76”, eds. R. E. Smallman and J. E. Harris: *Metals Soc.*, 1976. p. 63.
26. R. Bullough and M. R. Hayns: *J. Nucl. Mat.* 65, 185, 1977.
27. C. Cawthorne and E. J. Fulton: *Nature*, 216, 575, 1966.
28. First Topical Meeting on Fusion Reactor Materials Science, *J. Nucl. Mat.* 85—86, 1979.
29. A. D. Marwick, in [21], p. 39.
30. J. R. Matthews: *Contemp. Phys.* 18, 571, 1977.
31. A. N. Goland: *J. Nucl. Mat.* 85—86, 453, 1979.
32. K. L. Merkle: *Radiation Damage in Metals*, eds. N. L. Peterson and S. D. Harkness: *ASM, Metal Park*, 1976. p. 58.
33. J. R. Beeler: *Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals*, Washington, 1976. Vol. 1. p. 28.
34. J. W. Corbett, R. B. Smith and R. M. Walker: *Phys. Rev.* 114, 1460 (1959).
35. A. Seeger, D. Schumacher, W. Schilling and J. Diehl (eds.): *Vacancies and Interstitials in Metals*, North-Holland, Amsterdam, 1970.
36. N. L. Peterson and R. W. Siegel (eds.): *Properties of Atomic Defects in Metals*, North-Holland, Amsterdam, 1978.
37. Vörös Gy.: *Magyar Fizikai Folyóirat*, 30, 403, 1982.
38. R. S. Nelson, D. J. Mazey and J. A. Hudson: *J. Nucl. Mat.* 37, 1, 1970.
R. S. Nelson and D. I. Mazey: *Proc. IAEA Symp. on Radiation Damage in Reactor Materials*, Vol. 2. 1969. Vienna.
39. V. F. Zelenskij, V. E. Ivanov, O. D. Kazacskovszkij, V. A. Cükanov u P. A. Platonov: *Reaktornoe materialovegyenie*, Tom 1., Moszkva, 1978. p. 30.
J. A. Hudson and R. S. Nelson: *Reaktornoe materialovegyenie*, Tom 1., Moszkva, 1978. p. 265.
40. Regel V. P. et al.: *Szoobscsenija OIJAI Dubna* 18—12741, 1979.
Afanaszjev V. D. et al.: *Szoobscsenija OIJAI Dubna*, 18—829, 1980.
41. J. Narayan, O. S. Oen and T. S. Noggle: *J. Nucl. Mat.* 71, 160, 1977.
42. F. L. Vooh et al., *Rev. Mod. Phys.* 47, Suppl. No. 3, 1975.
43. L. M. Brown, A. Kelly and R. M. Mayer: *Phil. Mag.* 19, 721, 1969.
44. M. J. Makin: *Phil. Mag.* 20, 1133, 1969.
45. M. Kiritani: *J. Phys. Soc. Japan*, 35, 95, 1973.
46. A. D. Brailsford and R. D. Bullough: *Phil. Mag.* 27, 49, 1973.
47. A. D. Brailsford and R. D. Bullough: „Vacancies 76” eds. R. E. Smallman and J. E. Harris, *Metals Soc.* 1976. p. 108.
48. K. C. Russel: *Acta Met.* 26, 1951, 1978.
49. M. Rühle, F. Häussermann and M. Rapp: *Phys. Stat. Sol.* 39, 609, 1971.
50. R. M. Mayer: *J. Microscopy*, 110, 133, 1977.
51. C. A. English, B. L. Eyre, A. F. Bartlett and H. N. A. Wadley: *Phil. Mag.* 24, 181, 1977.
52. R. M. Mayer, L. M. Brown and U. Gösele: *J. Nucl. Mat.* 95, 44, 1980.
53. C. T. Dienes and A. C. Damask: *J. Appl. Phys.* 29, 1713, 1958.
54. H. Wiedersich: *Radiation Effects*, 12, 111, 1972.
55. A. C. Damask and A. J. Dienes: *Point Defects in Metals*, Gordon and Breach, New York, 1971.
56. W. A. Wolfner and M. Ashkin: *Scripta Met.* 7, 1175, 1973.
57. R. M. Mayer and L. M. Brown: *J. Nucl. Mat.* 95, 46, 1980.
58. R. M. Mayer and L. M. Brown: *J. Nucl. Mat.* 95, 58, 1980.
59. U. Gösele and R. M. Mayer: *J. Nucl. Mat.* 95, 64, 1980.
60. R. M. Mayer: *J. Nucl. Mat.* 95, 75, 1980.
61. R. M. Mayer: *J. Nucl. Mat.* 95, 83, 1980.
62. I. Kovács and L. Zsoldos: *Dislocations and Plastic Deformations*, Akadémiai Kiadó—Pergamon Press, Budapest, 1973.

63. R. Bullough and R. C. Newman: Rep. Progr. Phys. 33, 101, 1970.
64. P. T. Heald: Phil. Mag. 30, 915, 1975.
65. D. I. R. Norris: The Physics of Irradiation Produced Voids, ed. R. S. Nelson: Harwell 9—11th Sept. AERE, R7934 (HMSO), 1975. p. 134.
66. L. N. Davidov, N. M. Kirjuhin: Voproszű atomnoj nauki i tehniki, Szeria: Fizika radiacionűh provrazsgyenij i radiacionnoje materialovogyenie, (Vűp) HFTI, AN, USZSZR, Harkov, 1978. p. 3.
67. R. Bullough and J. R. Willis: Phil. Mag. 31, 855, 1975.
68. P. T. Heald and M. V. Speight: Phil. Mag. 29, 1055, 1974.
69. A. R. Odette: J. Nucl. Mat. 85—86, 533, 1979.
70. R. M. Mayer and L. M. Brown: J. Nucl. Mat. 95, 92, 1980.
71. R. M. Mayer: J. Nucl. Mat. 95, 100, 1980.
72. J. A. Hudson: J. Nucl. Mat. 60, 89, 1976.
73. L. K. Mansur and M. H. Yoo: J. Nucl. Mat. 85—86, 523, 1979.
74. M. K. Hossain and L. M. Brown: Radiation Effects, 31, 203, 1977.
75. M. R. Hayns: J. Nucl. Mat. 65, 16, 1977.
76. D. J. Mazey and R. S. Nelson: J. Nucl. Mat. 85—86, 671, 1979.
77. R. S. Nelson, J. A. Hudson and D. J. Mazey: J. Nucl. Mat. 44, 318, 1972.
78. P. Z. Maziasz: J. Nucl. Mat. 85—86, 713, 1979.
79. F. S. Ham: J. Phys. Chem. Solids, 6, 335, 1958.
80. A. D. Brailsford: J. Nucl. Mat. 91, 221, 1980.
81. D. I. Potter and H. A. Hoff: Acta Met. 24, 1155, 1976.
D. I. Potter and D. A. Ryding: J. Nucl. Mat. 71, 14, 1977.
82. R. A. Johnson and N. Q. Lam: Phys. Rev. B13, 4364, 1976; Phys. Rev. B15, 1794, 1977; J. Nucl. Mat. 69—70, 424, 1978.
83. Workshop on Solute Segregation and Phase Stability during Irradiation, J. Nucl. Mat. 83, 1979.
84. M. J. Makin: Progress in Nuclear Energy, Metallurgy and Fuels, Oxford, 1956.
H. R. Higgy and F. H. Hamad: J. Nucl. Mat. 55, 177, 1975.
85. Kovács I.: Magyar Fizikai Folyóirat, 25, 113, 1977.
86. R. L. Fish and J. J. Holmes: J. Nucl. Mat. 46, 113, 1973.
87. D. R. Harris: Reaktornnoje materialovogyenie, Tom. 2. Moszkva, 1978. p. 160.
J. J. Holmes and J. L. Straalsund: Proc. Int. Conf. „Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials”, Scottsdale, Arizona, June, 1977. Met. Soc. AIME, New York, 1977. p. 53.
88. a) V. A. Nikolajev: Voproszű atomnoj nauki i tehniki, Szerija: Fizika radiacionűh povrezsdenij i radiacionnoje materialovedenie, 2, 13, 1980. p. 47.
b) Sz. N. Votinov et. al., Radiacionnaja fizika tvordovo tela i reaktornnoje materialovedenie, Atomizdat, 1970. p. 82.
c) Sz. N. Votinov: Voproszű atomnoj nauki i tehniki, Szerija: Fizika radiacionűh povrezsdenij i radiacionnoje materialovedenie, 3 (8), 1978. p. 26.
d) Nekotorűe problemű fiziki radiacionűh povrezsdenij materialov, Naukova, Dunka, 1979.
89. I. Kovács: Proc. X. Conf. Metallurgy and Material Testing, Balatonaliga, Res. Inst. Iron Press, Budapest, 1979. p. 37.
90. E. Orowan: Symp. on Internal Stresses in Metals and Alloys, Inst. Metals, 1948. p. 451.
91. Kovács I. és Lendvai J.: A szilárdtest kutatás újabb eredményei, 10, 1981. p. 200.
92. L. M. Brown and R. K. Ham: Strengthening Methods in Crystals, eds. A. Kelly and R. B. Nicholson: Elsevier, Amsterdam, 1971.
93. V. Gerold: Z. Metallkde, 62, 796, 1971.
94. M. E. Fine: Met. Trans. 6A, 625, 1975.
95. I. Kovács, J. Lendvai, T. Ungár, G. Groma and J. Lakner: Acta Met, 28, 1621, 1980.
96. Lendvai J.: Magyar Fizikai Folyóirat, 29, 329, 1981.
97. A. L. Bemont: Rev. Roum. Phys. 17, 361, 1972.
98. U. F. Kocks: Proc. of V. Conf. on the Strength of Metals and Alloys, Aachen, 1979. Vol. 3. p.
99. A. J. Foreman: Phil. Mag. 17, 353, 1968.
100. A. Seeger: Radiation Damage in Solids, IMEA, Vienna, 1962. p. 105.
101. U. F. Kocks, A. S. Argon, and M. F. Ashby: Thermodynamics and Kinetics of Slips, Progr. Mat. Sci. Vol. 19, Pergamon Press, Oxford, 1975.
102. Kovács I.: Magyar Fizikai Folyóirat, 28, 1981.

103. *J. H. Gittus*: Creep, Viscoelasticity and Creep Fracture in Solids, Appl. Sci. Publ., London, 1975.
104. *Brájer L., Kovács I. és Tasnádi P.*: Magyar Fizikai Folyóirat, 23, 442, 1975.
105. *Lendvai J.*: Magyar Fizikai Folyóirat, 28, 37, 1980.
106. *D. R. Harries*: J. Nucl. Mat. 65, 157, 1977.
107. *D. Mosdale et al.*: Nature, 224, 1301, 1969.
108. *D. Mosdale and A. W. Lewthwait*: Proc. Iron and Steel Just. Conf. on Creep Strength in Steel and High Temperature Alloys, Sheffield University, 1972. p. 169.
109. *R. J. Me Elroy, J. A. Hudson and R. S. Nelson*: Proc. Int. Coll. on Measurement of Irradiation Enhanced Creep in Nuclear Materials, 1976.
110. *P. Jung, C. Schwaiger and H. Ullmayer*: J. Nucl. Mat. 85—86, 867, 1979.
111. *E. P. Simonen and P. L. Hendrich*: J. Nucl. Mat. 85—86, 873, 1979.
112. *W. A. Wolfer and M. Ashkin*: Scripta Met. 7, 1175, 1973.
113. *P. T. Heald and M. V. Speight*: Phil. Mag. 30, 869, 1974.
114. *P. T. Heald and M. V. Speight*: Acta Met. 23, 1389, 1975.
115. *A. C. Roberts and A. H. Cottrell*: Phil. Mag. 1, 711, 1956.
116. *R. V. Hesketh*: J. Nucl. Mat. 26, 77, 1968.
117. *R. V. Hesketh*: Phil. Mag. 7, 1417, 1962.
118. *A. W. Lewthwaite*: J. Nucl. Mat. 46, 324, 1973.
119. *R. Bullough*: Conf. on Fundamental Effects of Radiation Damage in Metals, Gatlinburg, 1975.
120. *J. H. Gittus*: Phil. Mag. 25, 345, 1972.
121. *J. H. Gittus*: Phil. Mag. 28, 261, 1973.
122. *J. H. Gittus*: Phil. Mag. 30, 751, 1974.
123. *S. N. Buckley and S.A. Manthorpe*: J. Nucl. Mat. 65, 295, 1977.

SZABAD ELEKTRONOK ÉS INTENZÍV FÉNY KÖLCSÖNHATÁSÁNAK ELMÉLETI VIZSGÁLATA

VARRÓ SÁNDOR

az MTA KFKI-SZFKI
Szilárdtest-elméleti Osztály, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	399
1. Az intenzív fényterek szabad elektronon történő szóródásának klasszikus elektrodinamikai modellje	403
1.1. Elektronpályák elektromágneses síkhullámtérben	403
1.2. Monokromatikus fényben mozgó elektron sugárzási tere. Intenzív Thomson-szórás	409
2. Klasszikus elektron kvantált sugárzási tere	413
3. Külső elektromágneses síkhullámokkal kölcsönható nemrelativisztikus szabad elektronok kvantummechanikai leírása	415
3.1. Nemrelativisztikus elektron hullámfüggvényei külső elektromágneses síkhullámtérben	415
3.2. Nemrelativisztikus elektron többfotonos kényszerített fékezési sugárzása	419
Megjegyzés	422
4. Nemrelativisztikus szabad elektron kölcsönhatása kvantált sugárzási térrel	422
4.1. A „nemrelativisztikus szabad elektron + kvantált e. m. módus” rendszer egzakt állapotai	422
4.2. Többfotonos kényszerített fékezési sugárzás kvantált elektromágneses térben	428
5. Elektron-elektron szórás intenzív fény jelenlétében	430
6. Relativisztikus szabad elektron és intenzív fény kölcsönhatásának szemiklasszikus elmélete	434
6.1. Volkov-állapotok	434
6.2. Az elektron relativisztikus hullámegyenleteinek peremértékproblémája elektromágneses síkhullámtérben. Green-függvények	439
6.3. Szórásszámítás. Furry-kép	441
6.4. Intenzív Compton-szórás skalár elektronon	444
7. Relativisztikus szabad elektron kölcsönhatása kvantált sugárzási térrel	446
7.1. A „relativisztikus szabad elektron + kvantált e. m. módus” rendszer egzakt állapotai	447
7.2. Kvantált elektromágneses sugárzás nemlineáris Compton-szórása	450
Összefoglalás	451
Köszönetnyilvánítás	453
Irodalomjegyzék	453

Bevezetés

A fény-elektron kölcsönhatás a fizika egyik legrészletesebben tanulmányozott jelensége, s így az e területhez tartozó alapvető folyamatok főbb kísérleti és elméleti vonatkozásai már régóta ismertek. A lézerek felfedezése azonban olyan nagy intenzitású fényterek kísérleti alkalmazását tette lehetővé, amelyek különböző anyagokkal

* Érkezett 1981. szept. 20. Egyetemi doktori értekezés. Témavezető: dr. Bergou János.

való kölcsönhatását a klasszikus, ill. a kvantumelektrodinamika hagyományos módszerével már nem lehet tárgyalni.

Az intenzív fény hatására az anyag nemlineárisan válaszolhat. Ezen azt értjük, hogy a válasz valamilyen mértéke (pl. a fémek felületi fotoeffektusa esetében a kilépő elektronok áramsűrűsége) az intenzitás magasabb hatványaival lehet arányos. Ezért az ilyen folyamatokat nemlineáris folyamatoknak nevezzük. A nemlineáris optika olyan fény-anyag kölcsönhatásokkal foglalkozik amely során az anyag halmazállapota nem változik. Az e tárgykörbe tartozó egyik tipikus jelenség a frekvenciakétszerezés kristályokon. Bizonyos kristályok válaszfüggvénye (szuszceptibilitása) erősen intenzitásfüggő lehet, ezért a ráeső fény másodharmonikusa szerint is modulálódhat, tehát a kijövő kétszeres frekvenciájú jel erőssége a gerjesztés intenzitásának négyzetével lesz arányos.

Az olyan intenzív fény számára, amely elektromos vektorának amplitúdója az atomi kötéseknek megfelelő térerősségek nagyságrendjébe esik, minden anyag egyszerűen szabad töltött részecskék halmazaként (plazmaként) jelenik meg. A fémek nemlineáris fotoeffektusa esetében is a kilépő elektronokat a fény szabad töltéseként „látja”. Az ide tartozó jelenségekkel az intenzív tér elektrodinamika foglalkozik. Mindezek alapján érthető, hogy a lézerek megjelenését követően a szabad töltések intenzív fénybeli viselkedését sok kutató kezdte tanulmányozni, s az intenzív tér elektrodinamika szűzterületeinek száma rohamosan csökken.

Dolgozatunkkal ehhez a munkához szeretnénk hozzájárulni a szabad elektronok és intenzív fény kölcsönhatása leírásához használható különböző szintű modellek egzakt megoldásának szisztematikus elemzésével, és néhány új eredmény közlésével.

Az elektromágneses sugárzási tér és szabad töltések kölcsönhatásának szokásos kvantumelektrodinamikai tárgyalása perturbációszámítással történik, amely során a kölcsönhatást — erősségtől függően — különböző rendekben kell figyelembe venni. Például, ha az elektron n egy módusba tartozó fotont abszorbeál és egy más módusbeli fotont emittál, akkor e folyamat leírása céljából $(n+1)$ -edrendű perturbációszámítást kell végezni. A folyamat átmeneti valószínűsége a beeső elektromágneses ($e. m.$) tér intenzitásának n -edik hatványával lesz arányos. (Ez esetben a „nemlineáris” és „többfotonos” kifejezéseket azonos jelentéssel használhatjuk.) Elegendően nagy fényintenzitásoknál helyes eredményt vagy a perturbációs sor felösszegzésével kaphatunk (ez általában igen nehéz matematikai feladat), vagy olyan nemperturbatív módszert kell alkalmaznunk, amellyel az intenzív fény és elektron kölcsönhatását már eleve egzaktul figyelembe vesszük. Dolgozatunkban ilyen nemperturbatív eljárások működését vizsgáljuk az elektron-fény kölcsönhatáskor lejátszódó néhány tipikus nemlineáris folyamat (intenzív fény szóródása, kényszerített nemlineáris fékezési sugárzás, elektron—elektron szórás intenzív fényben) elemzése céljából. Hogy mit értünk nagy fényintenzitáson azt az alábbiakban tisztázzuk.

Az első fejezetben ki fog derülni, hogy a fény és elektron közötti csatolás a

$$v \equiv \frac{ea_0}{mc^2}$$

ún. intenzitásparaméterrel jellemezhető, amelyben e , ill. m az elektron töltése, ill. nyugalmi tömege, c a vákuumbeli fénysebesség, és a_0 a fény vektorpotenciáljának amplitúdója. Kvantált sugárzási tér vektorpotenciáljának nincs aktuális értéke, ekkor $a_0 \rightarrow \alpha_0 \equiv (c/\omega)(2\pi\hbar\omega_0)^{1/2}$ -nel azonosítjuk, ahol ω a tekintett fénymódus kör-

frekvenciája, \hbar a Planck-állandó 2π -ed része és ϱ a foton-sűrűség várható értéke (α_0 amplitúdójú klasszikus monokromatikus síkhullám átlagos energiasűrűsége éppen $\hbar\omega\varrho$). Az „elegendően nagy fényintenzitás” azt jelenti, hogy a v csatolási állandó értéke egységnyi (vagy annál nagyobb) nagyságrendű. A $v \sim 1$ feltétel klasszikus fizikai tartalmának megállapítása érdekében célszerű v -t a következő alakra hozni:

$$v = (I/\mathcal{I})^{1/2}, \quad \mathcal{I} \equiv [2\pi mc^2/(r_0/c)\lambda^2]^{1/2}$$

($r_0 \equiv \frac{e^2}{mc^2}$ a klasszikus elektron sugár, $\lambda \equiv \frac{2\pi c}{\omega}$ a fény hullámhossza, $I = \frac{c}{8\pi} \left(2\frac{\omega}{c} a_0\right)^2$ az intenzitása), \mathcal{I} a kritikus intenzitás.

Az első fejezetben látni fogjuk, hogy egy kezdetben nyugvó elektron a v intenzitásparaméterű monokromatikus fény bekapcsolása után fényfrekvenciás rezgőmozgásba kezd és $\sim mc^2 v^2$ átlagos többletenergiát nyer, ha $v \sim 1$ akkor ez a pont megegyezik mc^2 -tel. A fentiek szerint $v \sim 1$ esetén a λ^2 felületen az elektron-fény kölcsönhatás (r_0/c) karakterisztikus ideje alatt átáramló sugárzási energia megegyezik az elektron mc^2 nyugalmi energiájával. A kvantummechanika nyelvén ezt úgy is mondhatjuk, hogy az $r_0\lambda^2$ kölcsönhatási térfogatban levő fotonok $r_0\lambda^2 \hbar\omega$ összenergiája mc^2 . Ekkor optikai párkeltés lehetséges. A lézeres fúziós kísérletekben a $v \sim 10$ – 100 értékeket is elérték már, tehát nem kizárt, hogy a közeljövőben az optikai párkeltést kísérletileg észlelni fogják. Dolgozatunkban ilyen folyamatokkal nem foglalkozunk, vagyis az elektronszám esetleges változásától eltekintünk, s így az elektronter másodkvantálására nem lesz szükségünk. Eredményeink tehát az $I < \mathcal{I}$ intenzitástartományban érvényesek.

Amint már említettük a jelen értekezés célja a szabad elektronok és intenzív sugárzási tér (lézerefény) kölcsönhatásának leírásához eddig kidolgozott nemperturbatív módszerek rendszeres összefoglalása és továbbfejlesztése. Ennek megfelelően először az intenzív fény szabad elektronon történő szóródásának egzakt klasszikus elektrodinamikai tárgyalását adjuk, s így a nemlineáris folyamatokra egy jól ismert modell keretein belül mutathatunk be példát. A kapott eredményeket ezután a fény kvantumelektrodinamikája alapján általánosítjuk.

Az elektron-fény kölcsönhatás vizsgálata során általában nem elegendő az elektron klasszikus mechanikai leírása, ezért a dolgozat további fejezeteiben az elektront kvantummechanikai objektumként kezeljük.

A szabad elektronok intenzív sugárzási tér jelenlétében lejátszódó kvantummechanikai szórásfolyamatai a következő általános séma szerint tárgyalhatók. Először megoldjuk az intenzív sugárzási móduval kölcsönható elektron hullámegyenletét, majd e megoldásokat bázisként használva perturbációszámítást végzünk az elektront érő egyéb hatások (pl. egy ion Coulomb-tere, egy másik e. m. módus) leírása céljából. Az intenzív módust tehát egzaktul figyelembe vesszük, s így az elektron e móduval való kölcsönhatását tetszés szerint rendben tanulmányozhatjuk.

A szabad elektron előbb említett egzakt hullámfüggvényeinek ismerete kulcsfontosságú, ezért dolgozatunkban jelentős teret szentelünk e hullámfüggvények vizsgálatának.

Az elektron és fény kölcsönhatásának leírása különböző szinteken történhet, attól függően, hogy e két objektumot pályával, c -szám térmennyiségekkel avagy

kvantált térmennyiségekkel írjuk-e le. A lehetséges kombinációkat az 1. táblázatban foglaltuk össze.

1. TÁBLÁZAT

A fény-elektron kölcsönhatás leírási módszerei (a geometriai optikát csak a szimmetria kedvéért tüntettük fel). A sorszámok a dolgozat megfelelő fejezeteit jelölik

<div>Fény Elektron</div>	Pálya (geometriai optikai)	Tér (Maxwell- elmélet)	Kvantált tér (foton-kép)
Pálya (klasszikus mechanika)		1.	2.
Tér (hullám- mechanika)		Szemiklasszikus elmélet 3., 5., 6.,	4., 7.
Kvantált tér,			Kvantum- elektrodi- namika

A harmadik fejezetben a lézerefénnyel kölcsönható nemrelativisztikus szabad elektron kvantummechanikai állapotait tanulmányozzuk és megvonjuk a Schrödinger-egyenlet ilyen problémákra való alkalmazhatóságának határait, majd elemezzük a nemlineáris kényszerített fékezésű sugárzást.

Ezt követően a fényt kvantált sugárzásként kezelve a 3. fejezet szemiklasszikus eredményeinek mélyebb megalapozását adjuk, amelyen azt értjük, hogy a külső tér közelítésén túlmenve az intenzív fénymódusban bekövetkező változásokat is analizáljuk.

Az ötödik fejezetben kiszámítjuk a lézerefény jelenlétében lezajló nemrelativisztikus elektron-elektron szórást leíró effektív potenciált, amely számot ad a lézerefényben tartózkodó elektronok effektív vonzásáról, és megvizsgáljuk az ún. belső rezonanciákat is.

A hatodik fejezetben a relativisztikus szabad elektron és intenzív fény kölcsönhatásának szemiklasszikus elméletét tanulmányozzuk a megfelelő Dirac-, ill. Klein—Gordon-egyenlet megoldásai segítségével. Vázoljuk az intenzív tér elektrodinamika Furry-képbeli felépítésének főbb lépéseit, majd meghatározzuk a nemlineáris kényszerített fékezésű sugárzás, és skalár elektronon történő intenzív Compton-szórás hatáskeresztmetszeteit.

Végül elvégezzük a hatodik fejezet eredményeinek kvantumelektrodinamikai általánosítását, amely az eddig általánosan használt külső tér közelítésnél finomabb leírást tesz lehetővé.

1. Az intenzív fényterek szabad elektronon történő szóródásának klasszikus elektrodinamikai modellje

Jelen fejezetben a klasszikus elektrodinamikára támaszkodva részletesen elemezzük monokromatikus fényhullámok szabad elektronon való szóródását. Az ilyen típusú folyamatok leírásának szokásos útján járva először megoldjuk a fény elektromágneses hatásainak kitett pontszerű elektron mozgásegyenletét. A kapott elektronpályák segítségével előállítjuk az elektron által képviselt négyesáramsűrűséget, amelyet ezután a szórt sugárzás négyespotenciálját meghatározó potenciálegyenletekben forrástagként szerepeltetünk. A potenciálegyenleteket megoldva kitűnik, hogy a szórt sugárzásban a beeső fény minden felharmonikusa jelen van. Végül meghatározzuk a felharmonikusok differenciális hatáskeresztmetszeteit, és ezek ismeretében elemezzük a beeső fény intenzitásának a szórásfolyamatban játszott szerepét.

1.1. Elektronpályák elektromágneses síkhullámtérben

Az e töltésű, m nyugalmi tömegű elektron relativisztikus Newton-egyenlete az \mathbf{E} elektromos térerősségű, \mathbf{B} mágneses indukciójú elektromágneses térben

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \right) = e(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}); \quad \mathbf{v} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad (1.1)$$

ahol $\mathbf{r}(t)$ az elektron helye a t időpontban és c a vákuumbéli fénysebesség. Egy $\mathbf{k} = \mathbf{n}|\mathbf{k}|$ hullámvektorú, $\omega = c|\mathbf{k}|$ frekvenciájú és \mathbf{E} irányban lineárisan polarizált síkhullám esetében \mathbf{E} és \mathbf{B} konkrét alakja a fenti egyenletben a következő:

$$\mathbf{E} = E_0 \mathbf{E} \sin[\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}(t)], \quad \mathbf{B} = E_0 \mathbf{n} \times \mathbf{E} \sin[\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}(t)], \quad (1.2)$$

E_0 az elektromos térerősség amplitúdója, és \mathbf{E} és \mathbf{n} egymásra merőleges egységvektorok.

Mivel az \mathbf{E} és \mathbf{B} térmennyiségek az $\mathbf{r}(t)$ pálya nemlineáris függvényei ezért az (1.1) egyenlet első pillantásra meglehetősen bonyolultnak látszik, és ebben a formájában valóban nehezen kezelhető (Vachaspati 1962).

A probléma megoldásához a Hamilton—Jacobi elméletet hívjuk segítségül, de mielőtt ezt megtennénk essék néhány szó az elektron nemrelativisztikus mozgásáról. Ha $(v/c) \ll 1$, akkor (1.1) az alábbi egyenletre egyszerűsíthető

$$m\ddot{\mathbf{r}} = eE_0 \mathbf{E} \sin[\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}(t)] \quad (1.3)$$

(ponttal az idő szerinti deriválást jelöljük, $\dot{\mathbf{r}} \equiv (d\mathbf{r}/dt)$).

Ha (1.3) mindkét oldalát \mathbf{k} -val skalárisan szorozzuk, akkor $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}$ miatt a $\mathbf{k}\ddot{\mathbf{r}} = 0$, összefüggést kapjuk, következésképpen $\mathbf{k}\mathbf{r}(t) = \mathbf{k}\mathbf{r}_0 + \mathbf{k}\mathbf{v}_0 t$ (\mathbf{r}_0 az elektron kezdeti helye \mathbf{v}_0 a kezdősebessége). (1.3) tehát a következő alakra hozható:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = eE_0 \mathbf{E} \sin(\omega_D t - \varphi), \quad (1.3a)$$

ahol $\omega_D \equiv \omega - \mathbf{k}\mathbf{v}_0$ Doppler-eltolódott frekvencia és $\varphi \equiv \mathbf{k}\mathbf{r}_0$ a kezdőfázis. A nemrelativisztikus elektron transzverzális síkhullámtérben (1.3a) szerint úgy viselkedik

mintha homogén térben lenne. (1.3) megoldása közvetlen kiintegrálással megkapható

$$\mathbf{v}(t) = -\frac{eE_0}{m\omega_D} \mathbf{E} \cos(\omega_D t - \varphi) + \mathbf{v}_0, \quad (1.3b)$$

$$\mathbf{r}(t) = -\frac{eE_0}{m\omega_D^2} \mathbf{E} \sin(\omega_D t - \varphi) + \mathbf{v}_0 t + \mathbf{r}_0.$$

Az elektron mozgása egy szabad translációs mozgásból és egy \mathbf{E} irányú harmonikus oszcillációból tevődik össze. Az origóban átlagosan nyugvó elektron esetében ($\mathbf{r}_0 = \mathbf{v}_0 = 0$)

$$\mathbf{r}(t) = -\lambda v \mathbf{E} \sin \omega t, \quad \mathbf{v}(t) = -cv \mathbf{E} \cos \omega t, \quad (1.3c)$$

$$\lambda \equiv \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{c}{\omega}, \quad v \equiv \frac{eE_0}{m\omega c}, \quad (1.3d)$$

(1.3d)-ben bevezettük a v dimenziótlan intenzitásparamétert, amelynek a későbbiekben fontos szerepe lesz. Az elektron sebességamplitúdója cv , tehát fenti számolásunk akkor van összhangban a $(v/c) \ll 1$ feltétellel, ha $v \ll 1$. Ha v nem hanyagolható el az egység mellett, akkor a probléma relativisztikussá válik. v nagyságrendjének tanulmányozása céljából írjuk fel v -t a következő alakban:

$$v = \left(\frac{I}{\mathcal{I}} \right)^{1/2}, \quad \mathcal{I} \equiv \frac{c}{8\pi} \mathcal{E}_0^2, \quad \mathcal{E}_0 = \frac{e}{r_0 \lambda}, \quad (1.3e)$$

$r_0 \sim 10^{-13}$ cm a klasszikus elektron sugár. A fenti egyenletben definiált \mathcal{I} mennyiséget a λ hullámhosszhoz tartozó kritikus intenzitásnak nevezzük. Az \mathcal{E}_0 térerősségű sztatikus elektromos tér az elektronon $\lambda_C \equiv \frac{\hbar}{mc} \sim 10^{-11}$ cm Compton-hullámhossznyi úton éppen $\hbar\omega$ munkát végez (\hbar a Planck-állandó 2π -ed része),

$$e\mathcal{E}_0 \lambda_C = \hbar\omega. \quad (1.3f)$$

Például széndioxid lézer esetében $\lambda \sim 10^{-4}$ cm tehát \mathcal{E}_0 közel esik a Bohr-térerősség $E_B \equiv \frac{e}{a_B^2} \sim 10^9 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$ értékéhez, ($a_B \equiv (\hbar^2/me^2) \sim 10^{-8}$ cm).

E kis kitérő után kanyarodjunk most vissza az elektron relativisztikus leírásához. Ahelyett, hogy az (1.1) egyenlet megoldásával próbálkoznánk, a továbbiakban a vele ekvivalens

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\dot{\mathbf{p}}, \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \dot{\mathbf{r}} \quad (1.4)$$

kanonikus mozgásegyenleteket vizsgáljuk.

Itt

$$H = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \left[c^2 \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right]^{1/2} + e\Phi \quad (1.5)$$

az elektron Hamilton-függvénye amely számszerűleg nem más, mint az elektron teljes E energiája,

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} + e\Phi. \quad (1.5a)$$

A kanonikus impulzus

$$\mathbf{p} = \frac{mv}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (1.5b)$$

Az imént bevezetett Φ skalár- és \mathbf{A} vektorpotenciálból az (1.1) egyenletben szereplő \mathbf{E} és \mathbf{B} térmennyiségek a szokásos módon származtathatók (sugárzási mértékben $\Phi=0$),

$$\mathbf{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}, \quad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (1.5c)$$

Az (1.4) egyenletek megoldása céljából hajtsuk végre az

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}), \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) \quad (1.6)$$

kanonikus transzformációt, melynek generátorfüggvénye legyen $W(\mathbf{r}, \mathbf{P}, t)$. A legkisebb hatás Hamilton-féle elvének felhasználásával könnyen belátható, hogy

$$\mathbf{p} = - \frac{\partial W(\mathbf{r}, \mathbf{P}, t)}{\partial \mathbf{r}} \quad (1.7a)$$

és

$$\mathbf{Q} = - \frac{\partial W(\mathbf{r}, \mathbf{P}, t)}{\partial \mathbf{P}} \quad (1.7b)$$

fennállása esetén a \mathbf{Q} és \mathbf{P} új változók szintén kielégítik a kanonikus mozgásegyenleteket:

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \mathbf{Q}} = -\dot{\mathbf{P}}, \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \mathbf{P}} = \dot{\mathbf{Q}}, \quad (1.8)$$

ahol \bar{H} a transzformált Hamilton-függvény,

$$\bar{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t) = H - \frac{\partial W}{\partial t}. \quad (1.9)$$

Ha $(\partial W / \partial t) = H$, akkor \bar{H} azonosan nulla, tehát (1.8) szerint az új változók mozgás-állandók. Ez esetben W az elektron hatásfüggvénye, $W = S$. A részecske pályáját az (1.7b) implicit összefüggésből határozhatjuk meg ha S -et ismerjük. Fő feladatunk tehát az S hatásfüggvény meghatározása, amely (1.7a) és $(\partial S / \partial t) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ miatt kielégíti az alábbi egyenletet

$$\frac{\partial S}{\partial t} = H\left(\mathbf{r}, -\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}}, t\right). \quad (1.10)$$

A továbbiakban az (1.10) Hamilton—Jacobi egyenletét tanulmányozzuk. Először a jobb áttekinthetőség érdekében formuláinkat kovariáns alakra hozzuk. Bevezetjük a

$$p = \{p^\mu\} = \left(\frac{H}{c}, \mathbf{P}\right), \quad x = \{x^\mu\} = (ct, \mathbf{r}), \quad (1.11a-b)$$

$$P = \{P^\mu\} = (P_0, \mathbf{P}), \quad Q = \{Q^\mu\} = (Q_0, \mathbf{Q}) \quad (1.11c-d)$$

négyesvektorokat és a

$$\partial = \{\partial_\mu\} = \left\{\frac{\partial}{\partial x^\mu}\right\}, \quad \partial_P = \left\{\frac{\partial}{\partial P^\mu}\right\}, \quad (1.11e-f)$$

négyesnablákat (a μ index lehetséges értékei: 0, 1, 2, 3).

Két tétszőleges a és b négyesvektor skalárszorzatát $a \cdot b$ -vel jelöljük és a következőképpen definiáljuk:

$$a \cdot b = a^\mu b^\nu g_{\mu\nu} = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \quad a \cdot a \equiv a^2, \quad (1.11g-h)$$

ahol

$$g_{00} = -g_{ii} = 1 \quad (i = 1, 2, 3), \quad g_{\mu\nu} = 0 \quad (\mu \neq \nu) \quad (1.11i)$$

(1.7a) és (1.10) ezek után az alábbi alakban foglalhatók össze

$$p = \partial S(x, P). \quad (1.12)$$

Hasonlóan, (1.7b) szerint

$$Q = \partial_P S(x, P). \quad (1.13)$$

Az (1.10) relativisztikus Hamilton—Jacobi egyenlet (1.5) figyelembevételével a következő racionális formára hozható (Rohrlich 1965):

$$\left(\partial S - \frac{e}{c} A\right)^2 = (mc)^2. \quad (1.14)$$

(1.14)-ben bevezettük az A négyespotenciált,

$$A = \{A^\mu\} = (\Phi, \mathbf{A}). \quad (1.15)$$

Transzverzális síkhullámot reprezentáló négyespotenciál csak a $k \cdot x = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ szorzattól függ, ahol k a négyeshullámvektor,

$$A = A(k \cdot x), \quad (1.16a)$$

$$k = \{k^\mu\} = (k_0, \mathbf{k}), \quad k_0 = |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}, \quad k^2 = 0. \quad (1.16b)$$

$$k \cdot A = 0 \xrightarrow{\Phi=0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (1.16c)$$

Monokromatikus és lineárisan polarizált hullám esetében

$$A = a_0 \epsilon \cos k \cdot x, \quad \epsilon = \{\epsilon^\mu\} = (0, \mathbf{E}). \quad (1.17)$$

E formai részletek után térjünk rá az (1.14) egyenlet megoldására.

Mivel síkhullámok esetén A csak a $\xi = k \cdot x$ változótól függ, ezért S -et a következő alakban keressük (Landau és Lifsic 1976)

$$S = P \cdot x + g(\xi), \quad (1.18)$$

ahol P tetszőleges állandó és $g(\xi)$ meghatározandó függvény. (1.18)-at (1.14)-be helyettesítve $g(\xi)$ -re az alábbi közöséges differenciálegyenlet adódik

$$P^2 + 2k \cdot P \frac{dg}{d\xi} - 2 \frac{e}{c} A \cdot P + \frac{e^2}{c^2} A^2 = (mc)^2, \quad (1.19)$$

amelynek megoldását közvetlen kiintegrálással megkaphatjuk,

$$g(k \cdot x) = \frac{1}{2k \cdot P} \int^{k \cdot x} d\xi \left[2 \frac{e}{c} P \cdot A(\xi) - \frac{e^2}{c^2} A^2(\xi) \right] - \frac{P^2 - (mc)^2}{2k \cdot P} k \cdot x. \quad (1.20)$$

Feltesszük, hogy P a szabad tömeghéjon van, azaz $P^2 = (mc)^2$. Ekkor (1.18) és (1.20) szerint

$$S(x, P) = P \cdot x + \frac{1}{2k \cdot P} \int^{k \cdot x} d\xi \left[2 \frac{e}{c} P \cdot A(\xi) - \frac{e^2}{c^2} A^2(\xi) \right]. \quad (1.21)$$

Az elektron négyesimpulzusa és pályája (1.12) és (1.13) alapján számítható:

$$p = P + \frac{k}{2k \cdot P} \left(2 \frac{e}{c} P \cdot A - \frac{e^2}{c^2} A^2 \right). \quad (1.22)$$

$$Q = x - \frac{k}{2(k \cdot P)^2} \int^{k \cdot x} d\xi \left[2 \frac{e}{c} P \cdot A(\xi) - \frac{e^2}{c^2} A^2(\xi) \right] + \frac{1}{k \cdot P} \frac{e}{c} \int^{k \cdot x} d\xi A(\xi). \quad (1.23)$$

Ha figyelembe vesszük, hogy az elektron kinetikus négyesimpulzusa (1.5a) és (1.5b) szerint a következő alakba írható:

$$p - \frac{e}{c} A = m \frac{dx}{d\tau}, \quad d\tau \equiv dt \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}, \quad (1.24)$$

és ha a fenti összefüggésbe p (1.22)-ben megadott kifejezését behelyettesítjük, akkor az alábbi egyenlethez jutunk

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{1}{m} \left[P + \frac{k}{2k \cdot P} \left(2 \frac{e}{c} P \cdot A - \frac{e^2}{c^2} A^2 \right) - \frac{e}{c} A \right]. \quad (1.25)$$

Az (1.25) egyenlet mindkét oldalát k -val skalárisan szorozva kapjuk, hogy

$$\frac{d}{d\tau} k \cdot x = \frac{1}{m} k \cdot P \rightarrow k \cdot x(\tau) = \frac{k \cdot P}{m} \tau + k \cdot x_{(0)}. \quad (1.25a)$$

($x_{(0)}$ tetszőleges konstans amelyet a továbbiakban nullának tekintünk.) Az egyszerűség kedvéért válasszuk $P \rightarrow P = (mc, \mathbf{0})$ -nak. Ez annak felel meg, hogy az elektron

kezdetben nyugszik. Ekkor $k \cdot x(\tau) = \omega\tau$. Az (1.25) egyenletet most már $x(\tau)$ minden komponensére megoldhatjuk, mivel a jobb oldalon τ ismert függvényei állnak.

$$x(\tau) = \frac{1}{m} P\tau + \frac{1}{m} \int^{\tau} dt' \left[\frac{k}{2k \cdot P} \left(-\frac{e^2}{c^2} A^2(\omega\tau') \right) - \frac{e}{c} A(\omega\tau') \right] \quad (1.26)$$

Az (1.17) potenciállal számolva $x(\tau)$ konkrét alakja:

$$x(\tau) = \frac{1}{m} P\tau - \lambda v \left(\epsilon \sin \omega\tau - \frac{1}{8} v n \sin 2\omega\tau \right) + \frac{1}{4} v^2 n c \tau, \quad (1.27a)$$

ahol $n \equiv (k/k_0) = (1, \mathbf{n})$ k irányú nullvektor és $v = \frac{ea_0}{mc^2}$ az (1.3d)-ben definiált intenzitásparaméterrel azonos. (1.27a) komponensekkel kiírva

$$x_0(\tau) = c\tau + \frac{1}{4} v^2 c \tau + \frac{1}{8} \lambda v^2 \sin 2\omega\tau, \quad (1.27b)$$

$$\mathbf{r}(\tau) = -\lambda v \left(\mathbf{\epsilon} \sin \omega\tau - \frac{1}{8} v \mathbf{n} \sin 2\omega\tau \right) + \frac{1}{4} v^2 \mathbf{n} c \tau. \quad (1.27c)$$

Az elektron mozgása tehát az $\mathbf{\epsilon}$ és \mathbf{n} vektorok által kifeszített síkban egy \mathbf{n} irányú translációból és egy lemniszkátán történő periódikus mozgásból tehető össze. A

$$v(\tau) \equiv \frac{dx}{d\tau} = \frac{1}{m} P - cv \left(\epsilon \cos \omega\tau - \frac{1}{4} v n \cos 2\omega\tau \right) + \frac{1}{4} v^2 cn \quad (1.28a)$$

négysébsésség komponensei a következők:

$$v_0(\tau) = c + \frac{1}{4} v^2 c + \frac{1}{4} v^2 c \cos 2\omega\tau, \quad (1.28b)$$

$$\mathbf{v}(\tau) = -cv \left(\mathbf{\epsilon} \cos \omega\tau - \frac{1}{4} v \mathbf{n} \cos 2\omega\tau \right) + \frac{1}{4} v^2 \mathbf{cn}. \quad (1.28c)$$

(1.27b), (1.28c) és (1.5a), valamint $d\tau$ (1.24)-beli definíciójának felhasználásával belátható, hogy az elektron összehajója

$$E = mc^2 \left(1 + \frac{v^2}{2} \cos^2 \omega\tau \right). \quad (1.28d)$$

$v \ll 1$ esetben (1.27c) és (1.28c) egybeesik az (1.3c)-ben megadott nemrelativisztikus eredménnyel.

Ha az (1.27a) és (1.28a) formulák által definiált pályákat az elektronon történő fényeszórás leírására akarjuk használni, akkor először tisztáznunk kell, hogy milyen kezdeti feltételeknek felelnek meg. A szórásfolyamatot úgy képzelhetjük el, hogy a kezdetben pl. nyugvó elektront egy fényhullámvonulat éri el, amelynek hatására az elektron oszcillálni kezd és sugároz. Az ilyen jelenségek tárgyalásához az általunk fentebb használt tiszta monokromatikus síkhullámok nem alkalmasak, mert amplitúdóik definíció szerint térben és időben állandók, vagyis ez esetben a „beeső fény”

mindig és mindenütt jelen van. Belátható azonban (Kibble 1965, Eberly 1969), hogyha a beeső fényt egy $e^{-\alpha|n \cdot x|}$ faktorial adiabatikusan be(ki) kapcsoljuk, akkor így az $n \cdot x = c\tau = -\infty$ saját időpontban nyugvó elektron pályájára kapott összefüggésekből az $\alpha \rightarrow +0$ határesetben reprodukálhatjuk az (1.27a) és (1.28a) képleteket bármely véges τ -ra. Leubner (1978) olyan négyezőamplitúdójú hullámvonulatot használt amelyre

$$A = \begin{cases} a_0 \in \cos k \cdot x, & \alpha|n \cdot x| < N \\ 0, & \alpha|n \cdot x| > N, \end{cases}$$

(a hullámvonulatban $2N$ periódus van, N nagy egész szám). Olyan x' -re amelyre pl. $\alpha n \cdot x' < -N$, az elektron nyugszik. Az $\alpha n \cdot x = -N$ pontban éri el a hullámvonulat. Ez a pont valójában nem tekinthető igazi bekapcsolási pontnak, mert az $\alpha n \cdot x' < -N$ feltételt kielégítő t' időpillanatok nagyobbak is lehetnek, mint az $\alpha n \cdot x \cong -N$ -ben szereplő t időpontok. Az adiabtikus bekapcsolásnál ilyen kauzalitási problémánk nincs, mert az $e^{-\alpha|n \cdot x|}$ faktor a $t = -\infty$ időpontban bármely véges r helyen zérus, tehát ezzel biztosítani tudjuk, hogy az elektron kezdetben teljesen szabad legyen.

1.2. Monokromatikus fényben mozgó elektron sugárzási tere Intenzív Thomson-szórás

Az $x(t)$ pályán $v(t)$ sebességgel mozgó pontszerű elektron

$$\varrho(\mathbf{r}, t) = e\delta_3(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t)) \quad (1.29a)$$

töltéssűrűséget, és

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = ev(t)\delta_3(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t)) \quad (1.29b)$$

áramsűrűséget képvisel (δ_3 háromdimenziós Dirac-delta). Az előző részben az $x(\tau)$ és $v(\tau)$ függvényeket tudtuk csak megkapni, tehát a mozgás jellemzői az elektron saját idejével paraméterezve állnak rendelkezésünkre, ez azonban teljesen elegendő az elektron sugárzási terét leíró A_s négyespotenciál kiszámításához. Egyszerűen belátható, hogy az elektron $j = \{j^\mu\} = (c\varrho, \mathbf{j})$ négyesáramsűrűsége a következő alakra hozható

$$j(x) = ce \int_{-\infty}^{\infty} v(\tau)\delta_4(x - x(\tau))d\tau, \quad (1.30)$$

ahol δ_4 négydimenziós Dirac-deltát jelöl.

A Maxwell-elmélet szerint A_s -t az alábbi inhomogén D'Alembert-egyenlet partikuláris megoldása szolgáltatja:

$$\partial^2 A_s = \frac{4\pi}{c} j. \quad (1.31)$$

A megoldást (1.31) $G(y-x)$ Green-függvényének ismeretében könnyedén felírhatjuk,

$$A_s(y) = \frac{4\pi}{c} \int d^4x G(y-x)j(x). \quad (1.32)$$

Definíció szerint $G(y-x)$ kielégíti a $\delta_4(y-x)$ forrású inhomogén D'Alembert-egyenletet,

$$\partial_y^2 G(y-x) = \delta_4(y-x), \quad (1.33)$$

amelynek megoldása (lásd pl. Jackson 1963):

$$G(y-x) = \frac{1}{4\pi c |\mathbf{R}-\mathbf{r}|} \delta\left(t - \frac{1}{c} |\mathbf{R}-\mathbf{r}| - \frac{1}{c} x_0\right), \quad ct > x_0, \quad (1.34)$$

ahol

$$\{y^\mu\} = (ct, \mathbf{R}), \quad \{x^\mu\} = (x_0, \mathbf{r}).$$

Az áramsűrűség (1.30) alakját (1.32)-be helyettesítve $A_s(y)$ -ra a következő eredmény adódik

$$A_s(y) = 4\pi e \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G(y-x(\tau)) v(\tau). \quad (1.35a)$$

G (1.34)-ben megadott előállítását figyelembe véve (1.35a) így írható:

$$A_s(\mathbf{R}, t) = \frac{e}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v(\tau) d\tau}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}(\tau)|} \delta\left(t - \frac{1}{c} |\mathbf{R}-\mathbf{r}(\tau)| - \frac{1}{c} x_0(\tau)\right). \quad (1.35b)$$

Az (1.35b)-ben szereplő integrálokat az $|\mathbf{R}| \rightarrow \infty$ határesetben számítjuk ki, vagyis feltesszük, hogy a szórt sugárzás \mathbf{R} észlelési helye nagyon messze van a forrástól. A szórt sugárzás skalárpotenciálja (1.35b), (1.27b—c) és (1.28b) alapján a következő alakra hozható

$$\begin{aligned} \Phi_s(\mathbf{R}, t) = & \frac{e}{R} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left(1 + \frac{v^2}{4} + \frac{v^2}{4} \cos 2\omega\tau\right) \times \\ & \times \exp\left\{i\eta\left(t - \frac{R}{c}\right) - i\eta \frac{v}{\omega} (\mathbf{s}\mathbf{E}) \sin \omega\tau - i\eta \frac{v^2}{8\omega} [1 - (\mathbf{s}\mathbf{n})] \sin 2\omega\tau - i\eta w\tau\right\}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

ahol $\mathbf{s} \equiv (\mathbf{R}/R)$ az észlelés irányába mutató egységvektor és

$$w \equiv 1 + \frac{v^2}{4} [1 - (\mathbf{s}\mathbf{n})]. \quad (1.36a)$$

(1.36) megkapásához felhasználtuk az $|\mathbf{R}-\mathbf{r}| \approx R - \mathbf{s}\mathbf{r}$ közelítést, valamint az (1.35b)-ben szereplő Dirac-delta Fourier-előállítását,

$$\delta(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ina} d\eta.$$

(1.36)-ban az exponenciális kifejezés Fourier-sorba fejthető a Jacobi—Anger-formula (Erdélyi 1953) segítségével, amely szerint

$$e^{iz \sin \varphi} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(z) e^{il\varphi}, \quad (1.37)$$

$J_l(z)$ l -edrendű elsőfajú Bessel-függvény. (1.37) alapján

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ -i\eta \frac{v}{\omega} (\mathbf{s}\mathbf{E}) \sin \omega\tau - i\eta \frac{v^2}{8\omega} [1 - (\mathbf{sn})] \sin 2\omega\tau \right\} = \\ & = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{l-2m} \left(-\eta \frac{v}{\omega} (\mathbf{s}\mathbf{E}) \right) J_m \left(-\eta \frac{v^2}{8\omega} [1 - (\mathbf{sn})] \right) \right] e^{il\omega\tau} \end{aligned} \quad (1.38)$$

(1.38) (1.36)-ba helyettesítése után, ha először τ szerint kiintegrálunk, akkor $\delta(l\omega - \eta w)$ típusú Dirac-deltákat kapunk, majd az η szerinti integrálást elvégezve Φ_s -re a következő formulát nyerjük

$$\Phi_s(\mathbf{R}, t) = \frac{e}{R} + \sum_{l=1}^{\infty} \Phi_s^{(l)}(\mathbf{R}, t), \quad (1.39)$$

ahol

$$\Phi_s^{(l)}(\mathbf{R}, t) \equiv \frac{2}{w} \left[C_l + \frac{v^2}{4} C_l + \frac{v^2}{8} (C_{l-2} + C_{l+2}) \right] \frac{e}{R} \cos \left[\frac{l\omega}{w} \left(t - \frac{R}{c} \right) \right], \quad (1.39a)$$

és

$$C_l \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{l-2m}(-\varrho) J_m(-\delta/2); \quad (1.39b)$$

valamint

$$\varrho \equiv \frac{lv}{w} (\mathbf{s}\mathbf{E}), \quad \delta \equiv \frac{lv^2}{4w} [1 - (\mathbf{sn})] = l \frac{w-1}{w}. \quad (1.39c)$$

A szórt sugárzás skalárpotenciálja egy sztatikus Coulomb teret és $(l\omega/w)$ frekvenciájú kifutó gömbhullámokat ír le. Belátható, hogy az (1.39b)-ben definiált C_l függvények kielégítik az alábbi rekurziós formulát:

$$2C_l + \varrho(C_{l-1} + C_{l+1}) + \delta(C_{l-2} + C_{l+2}) = 0. \quad (1.39d)$$

(1.39d) és az (1.39c) definíciók felhasználásával az $(l\omega/w)$ frekvenciájú komponens skalárpotenciálja a következő alakra hozható

$$\Phi_s^{(l)}(\mathbf{R}, t) = -\frac{1}{w} \frac{2}{[1 - (\mathbf{sn})]} [(\mathbf{sn})C_l + v(\mathbf{s}\mathbf{E})B_l] \frac{e}{R} \cos \left[\frac{l\omega}{w} \left(t - \frac{R}{c} \right) \right], \quad (1.40)$$

ahol

$$B_l \equiv \frac{1}{2} (C_{l-1} + C_{l+1}). \quad (1.40a)$$

(1.35b), (1.27b—c) és (1.28c) alapján az imént látott fogások segítségével a szórt sugárzás komponenseinek vektorpotenciáljára az alábbi kifejezést kapjuk

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_s^{(l)}(\mathbf{R}, t) = & -\frac{1}{w} \frac{2}{[1 - (\mathbf{sn})]} \{ [1 - (\mathbf{sn})] v B_l \mathbf{E} + \\ & + [C_l + v(\mathbf{s}\mathbf{E})B_l] \mathbf{n} \} \frac{e}{R} \cos \left[\frac{l\omega}{w} \left(t - \frac{R}{c} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.41)$$

A fentiek szerint a szórt fény spektruma diszkrét és az egyes komponensek $\omega(l)$ frekvenciái nem egyszerűen a beeső fény frekvenciájának egészszámu többszörösei, hanem egy intenzitásfüggő eltolódást is tartalmaznak. (1.36a) figyelembevételével

$$\omega(l) = \frac{l\omega}{1 + \frac{v^2}{2} \sin^2 \frac{\Theta}{2}} = \frac{l\omega}{w}. \quad (1.42)$$

ahol Θ a szórési szög, $\cos \Theta = \mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$.

Az egyes felharmonikusok differenciális hatáskeresztmetszeteinek meghatározása végett először az (1.40) és (1.41)-ben megadott potenciálokat használva előállítjuk a megfelelő térerősségeket,

$$E_s^{(l)} = -\text{grad}_{\mathbf{R}} \Phi_s^{(l)} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}_s^{(l)}, \quad \mathbf{B}_s^{(l)} = \text{rot}_{\mathbf{R}} \mathbf{A}_s^{(l)},$$

s ezután kiszámoljuk a szórt sugárzás \mathbf{S} Poynting-vektorának egy periódusra vett átlagértékét,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c}{4\pi} \langle \mathbf{E}_s^{(l)} \times \mathbf{B}_s^{(l)} \rangle = \mathbf{s} \cdot \frac{c}{8\pi} \left(\frac{l\omega}{cw^2} \right)^2 \frac{4e^2}{R^2} \left[(C_l \text{ctg} \frac{\Theta}{2} + vB_l \cos \varphi)^2 + \right. \\ \left. + (vB_l \sin \varphi)^2 \right] + O\left(\frac{1}{R^3}\right) \end{aligned} \quad (1.43)$$

$O(1/R^3)$ az $(1/R)$ -ben másodrendűnél magasabbrendű tagok összegét jelenti. (1.43)-ban Θ és φ az \mathbf{s} vektor polárszögei az \mathbf{E} , $\mathbf{n} \times \mathbf{E}$ és \mathbf{n} vektorok által kifeszített koordináta-rendszerben, $\mathbf{s} = (\sin \Theta \cos \varphi, \sin \Theta \sin \varphi, \cos \Theta)$. (1.43) alapján az l -edik felharmonikus differenciális hatáskeresztmetszetére a következőt kapjuk

$$\frac{d\sigma^{(l)}}{d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{2l}{w^2 v} \right)^2 \left[\left(C_l \text{ctg} \frac{\Theta}{2} + vB_l \cos \varphi \right)^2 + (vB_l \sin \varphi)^2 \right], \quad (1.44)$$

ahol $r_0 \equiv (e^2/mc^2) \sim 10^{-13}$ cm a klasszikus elektron rádiusz. Az itt közölt (1.44) eredmény tökéletes egyezésben van a Leubner (1978, 1981) által más módszerrel kapott differenciális hatáskeresztmetszettel, amely $v_0 = 0$ határesetben átmegy (1.44)-be.

(1.27b—c) és (1.28b—c) alapján megállapíthatjuk, hogy az (1.42)-ben szereplő $\frac{v^2}{2} \sin^2 \frac{\Theta}{2}$ intenzitásfüggő frekvenciaeltolódás az elektron $\frac{v^2}{4} c\mathbf{n}$ sebességű translációs mozgása következtében fellépő Doppler-eltolódás. Nem relativisztikus esetben (lásd (1.3c)-t) ez a drift nem jelentkezik, s az elektron az (1.27c)-ben paraméterezett lemniszkáta mozgás helyett egyszerűen lineáris harmonikus rezgőmozgást végez. Ekkor a szórt sugárzásban a pontos felharmonikusokat kapjuk (Jackson 1963), és

$$\frac{d\sigma_{NR}^{(l)}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} l^4 \left(\frac{2J_l(z_l)}{z_l} \right)^2, \quad (1.45)$$

$$z_l \equiv lv(\mathbf{s} \cdot \mathbf{E}), \quad \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = r_0^2 |\mathbf{s} \times \mathbf{E}|^2. \quad (1.45a-b)$$

$(d\sigma_{Th}/d\Omega)$ a Thomson-féle hatáskeresztmetszet. Mivel

$$\lim_{v \rightarrow 0} \frac{2J_l(z_l)}{z_l} = \delta_{l,1} \begin{cases} 0 & l \neq 1 \\ 1 & l = 1 \end{cases}$$

ezért kis intenzitásoknál ($v \ll 1$) a felharmonikus keltésnek nincs jelentősége és $(d\sigma^{(1)}/d\Omega)$ a Thomson-féle differenciális hatáskeresztmetszetre redukálódik.

2. Klasszikus elektron kvantált sugárzási tere

Az alábbiakban a külső elektromágneses síkhullámtérben mozgó nemrelativisztikus elektron kvantált sugárzási terét vizsgáljuk e tér Schrödinger-egyenletének egzakt megoldásai segítségével. Bebizonyítható, hogyha a sugárzási tér kezdetben vákuumállapotban volt, akkor bármilyen klasszikus áramforrás hatására minden módusa koherens állapotba kerül. Ezt az általános tételt használjuk fel a szabad elektron szóródó fény néhány statisztikus tulajdonságának elemzéséhez. Kiszámítjuk a szórt sugárzás normálmódusaihoz tartozó differenciális hatáskeresztmetszetek várható értékét és a kapott eredményt összevetjük az előző fejezetben látottakkal.

A $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ áramsűrűség sugárzási tere $|\Phi\rangle$ állapotvektorának időbeli változását kölcsönhatási képpen az alábbi egyenlet írja le (e fejezetben Coulomb-mértéket használunk),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi\rangle = \left(-\frac{1}{c} \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) |\Phi\rangle, \quad (2.1)$$

ahol $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ a sugárzási tér kvantált vektorpotenciálja, amely síkhullámok szerint kifejtve a következő alakú:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} [\mathbf{g}(\mathbf{k}, \lambda; \mathbf{r}, t) a_{\mathbf{k}, \lambda} + \mathbf{g}^*(\mathbf{k}, \lambda; \mathbf{r}, t) a_{\mathbf{k}, \lambda}^+], \quad (2.1a)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{k}, \lambda; \mathbf{r}, t) \equiv c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V} \right)^{1/2} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \lambda) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_k t)}, \quad \omega_k = c|\mathbf{k}|. \quad (2.1b)$$

\mathbf{k} az egyes Fourier-komponensek hullámvektora, $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \lambda)$ a \mathbf{k} -hoz tartozó λ indexű polarizációs egységvektor, V a kvantálási térfogat. Az $a_{\mathbf{k}, \lambda}$ és $a_{\mathbf{k}, \lambda}^+$ amplitúdók az

$$[a_{\mathbf{k}, \lambda}, a_{\mathbf{k}', \lambda'}^+] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\lambda, \lambda'}, [a_{\mathbf{k}, \lambda}, a_{\mathbf{k}', \lambda'}] = [a_{\mathbf{k}, \lambda}^+, a_{\mathbf{k}', \lambda'}^+] = 0 \quad (2.1c)$$

felcserélési relációkat elégíti ki.

(2.1) megoldása klasszikus áram esetében könnyen felírható (Glauber 1963b) (a lényegtelen fázisfaktorokat nem tüntetjük fel),

$$|\Phi(t)\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \lambda} D(\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(t)) |\Phi(t_0)\rangle, \quad (2.2)$$

ahol

$$D(\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(t)) \equiv \exp [\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(t) a_{\mathbf{k}, \lambda}^+ - \alpha_{\mathbf{k}, \lambda}^*(t) a_{\mathbf{k}, \lambda}], \quad (2.3)$$

és

$$\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(t) \equiv \frac{i}{\hbar c} \int_{t_0}^t dt \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \mathbf{g}^*(\mathbf{k}, \lambda; \mathbf{r}, t), \quad (2.4)$$

$|\Phi(t_0)\rangle$ a sugárzási tér kezdeti állapota. $|\Phi(t)\rangle$ (2.2) alakjának elemzése céljából felsoroljuk a (2.3)-ban definiált $D(\alpha)$ unitér operátorok néhány fontosabb tulajdonságát. A

$$D(\alpha) = e^{a^\dagger \alpha - \alpha^* a} \quad (2.5a)$$

által generált unitér transzformáció az a , ill. a^\dagger bozonoperátorokat α , ill. α^* értékekkel eltolja,

$$D^{-1}(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha, \quad D^{-1}(\alpha) a^\dagger D(\alpha) = a^\dagger + \alpha^*. \quad (2.5b)$$

Érvényes a következő szorzási szabály

$$D(\alpha) D(\beta) = D(\alpha + \beta) e^{i \operatorname{Im}(\alpha \beta^*)}, \quad (2.5c)$$

Im imaginárius részt jelent.

$D(\alpha)$ az α paraméterű koherens állapot keltőoperátora,

$$D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle, \quad (2.5d)$$

ahol $|\alpha\rangle$ az a operátor α sajátértékhez tartozó sajátállapota (α tetszőleges komplex szám lehet),

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (2.5e)$$

$|\alpha\rangle$ az $|n\rangle$ számsajátállapotok szerint kifejtett alakja a (2.5e) definíciós egyenletből könnyen megkapható,

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} |n\rangle, \quad (2.5f)$$

tehát, ha az adott módus koherens állapotban van, akkor a fotonszám $|\alpha|^2$ paraméterű Poisson-eloszlást követ,

$$P_n \equiv |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \quad (2.5g)$$

(2.2) és (2.5d) alapján megállapíthatjuk, hogy bármilyen klasszikus áram a vákuumból koherens állapotú elektromágneses teret generál.

Az (1.2) külső monokromatikus síkhullámok hatásainak kitett, nemrelativisztikus elektron \mathbf{j} áramsűrűsége (1.3c) alapján így írható

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -ce\nu \mathbf{E} \cos \omega t \delta_3(\mathbf{r} + \lambda \nu \mathbf{E} \sin \omega t). \quad (2.6)$$

Ezzel az árammal $\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}$ -ra (2.4), (2.1b) és (1.37) figyelembevételével a következő kifejezés adódik

$$\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(T/2) = -\frac{i}{\hbar} ce\nu \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V} \right)^{1/2} \mathbf{E} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \lambda) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{l J_l(\lambda \nu \mathbf{k} \mathbf{E})}{(\lambda \nu \mathbf{k} \mathbf{E})} \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_k + l\omega)t} dt \quad (2.7)$$

(J_l l -edrendű Bessel-függvény, $T/2 = t$, $-T/2 = t_0$).

(2.7)-ből kitűnik, hogy a $t \rightarrow \infty$ határesetben $\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}(T/2) \delta(\omega_k + l\omega)$ típusú Dirac-deltákat tartalmaz, tehát ha a rendszer kezdetben vákuum állapotban volt ($|\Phi(-\infty)\rangle = |0\rangle$), akkor a $|\Phi(+\infty)\rangle$ végállapotban csak az $l\omega$ frekvenciájú módusok maradnak gerjesztett állapotban. A szórásfolyamat során egy $\mathbf{s} = (\mathbf{k}/|\mathbf{k}|)$ irányba $d\Omega(\mathbf{s})$ térszögelem-

be egységnyi idő alatt kisugárzott energia várható értékének az $l\omega$ frekvenciához tartozó járuléka

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_l(s) \rangle &\equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{\lambda} \hbar l \omega \langle a_{l\omega s, \lambda}^+ a_{l\omega s, \lambda} \rangle = \\ &= r_0^2 |s x \mathbf{E}|^2 l^4 \left(\frac{2J_l(z_l)}{z_l} \right) I_0 d\Omega(s),\end{aligned}\quad (2.8)$$

ahol $I_0 = (cE_0^2/8\pi)$ a beeső külső tér intenzitása, és z_l definíciója ugyanaz mint (1.45a)-ban. (2.8) szerint az l -edik felharmonikus hatáskeresztmetszetének várható értéke megegyezik az első fejezetben a klasszikus elektrodinamika segítségével kapott (1.45) értékkel,

$$\left\langle \frac{d\sigma^{(l)}}{d\Omega(s)} \right\rangle \equiv \frac{\langle \varepsilon_l(s) \rangle}{I_0 d\Omega(s)} = r_0^2 |s x \mathbf{E}|^2 l^4 \left(\frac{2J_l(z_l)}{z_l} \right)^2. \quad (2.9)$$

3. Külső elektromágneses síkhullámokkal kölcsönható nemrelativisztikus szabad elektronok kvantummechanikai leírása

E fejezet első részében megoldjuk az elektromágneses síkhullámmal kölcsönható szabad elektron Schrödinger-egyenletét dipólközelítésben, majd dipólközelítésen túl, és megvizsgáljuk e megoldásrendszerek ortogonalitását, teljességét. A monokromatikus síkhullámok térfüggésének pontos figyelembevételével kapott hullámfüggvények analízise alapján a fénnel kölcsönható elektronok energiaspektrumának sáv- és szerkezetére következtetünk (optikailag indukált sáv szerkezet), s ennek kapcsán diszkutáljuk az intenzív fénnel kölcsönható elektron Schrödinger-egyenlettel való leírásának határait.

A második részben az intenzív sugárzási térben tartozkodó szabad elektron valamilyen háttérpotenciálon való szóródását vizsgáljuk. Kiszámoljuk az ilyen esetben lezajló indukált direkt és inverz fékezési sugárzás differenciális hatáskeresztmetszetét és áttekintjük a kapcsolódó kísérleti eredményeket.

3.1. Nemrelativisztikus elektron hullámfüggvényei külső elektromágneses síkhullámtérben

A szabad elektron Schrödinger-egyenlete az \mathbf{A} vektorpotenciállal jellemzett sugárzási térben

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.1)$$

ahol $\hat{\mathbf{p}}$ az elektron kanonikus impulzusának operátora és \hbar a Planck-állandó 2π -ed része.

Dipólközelítésben \mathbf{A} csak az időtől függ és (3.1) impulzusrepresentációban egyszerűen kiintegrálható (Bergou 1980). (3.1) általános megoldása

$$\psi(\mathbf{p}, t) = F(\mathbf{p}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int^t \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\tau) \right)^2 d\tau \right], \quad (3.2a)$$

ahol $F(\mathbf{p})$ tetszőleges függvény. ψ koordináta-reprezentációbeli alakja (3.2a)-ból Fourier-transzformálással kapható meg,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\mathbf{p}' \psi(\mathbf{p}', t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \quad (3.2b)$$

Ha az $F(\mathbf{p}')$ függvényt $\delta_3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ -nek választjuk, akkor $\psi(\mathbf{r}, t)$ (3.2a—b) szerint a következő formájú lesz

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int^t d\tau \left[\frac{e}{mc} \mathbf{p}\mathbf{A}(\tau) - \frac{e^2}{2mc^2} A^2(\tau) \right] \right\}, \quad E \equiv \frac{p^2}{2m} \end{aligned} \quad (3.3)$$

(Keldis 1964, Kohler 1966). Könnyen belátható, hogy a (3.3)-ban definiált $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ modulált síkhullámok ortogonális és teljes rendszert alkotnak.

Ha a vektorpotenciálban a térfüggést is figyelembe vesszük, akkor (3.1) megoldása már nem annyira triviális mint dipólközelítésben volt. Ebben az esetben (3.1) a következőképpen írható (koordináta reprezentációban):

$$\frac{1}{2m} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi) \right)^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.4)$$

$$\xi \equiv \omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}, \quad \omega = c|\mathbf{k}|, \quad \mathbf{k}\mathbf{A} = 0. \quad (3.4a)$$

A fenti egyenlet megoldását (3.3)-ra emlékezve keressük modulált síkhullám alakban,

$$\psi = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} f(\xi). \quad (3.5)$$

A moduláció itt tehát nemcsak az időtől függ, mint (3.3) esetében, hanem a teljes $\xi = \omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}$ hullámargumentumtól. (3.5)-öt (3.4)-be helyettesítve $f(\xi)$ -re az alábbi közönséges differenciálegyenletet kapjuk (vesszővel a ξ szerinti deriválást jelöljük)

$$\frac{\hbar\omega}{2mc^2 \left(1 - \frac{v_{\parallel}}{c}\right)} f'' + i f' + \frac{(e/mc) \mathbf{A}\mathbf{p} - (e^2 A^2/2mc^2)}{\hbar\omega \left(1 - \frac{v_{\parallel}}{c}\right)} f = 0, \quad (3.6a)$$

$$v_{\parallel} \equiv (\mathbf{n}\mathbf{p}/m), \quad (3.6b)$$

ahol \mathbf{n} a síkhullám terjedési irányába mutató egységvektor és v_{\parallel} a sebesség ezzel párhuzamos komponense. (3.6a)-ban a második derivált együtthatója lényegében a $\hbar\omega$ foton energia és az elektron-pozitron párkeltési energia hányadosa, amely optikai frekvenciák esetében igen kicsiny (10^{-6} nagyságrendű). Ha ezt a tagot elhagyjuk, akkor (3.6a) egyszerűen kiintegrálható a következő eredménnyel (Ehlotzky 1978, Nickle 1966)

$$f \approx \exp \left[-i \int d\xi \frac{(e/mc) \mathbf{p}\mathbf{A}(\xi) - e^2 A^2(\xi)/2mc^2}{\hbar\omega(1 - v_{\parallel}/c)} \right]. \quad (3.7)$$

A fenti közelítés jogossága azonban nemcsak a második derivált együtthatójának nagyságrendjétől függ. Ha (3.7)-et visszahelyettesítjük (3.6a)-ba, akkor — mivel a bal oldal második és harmadik tagjának összege nulla — az alábbi összefüggéshez jutunk

$$\frac{\hbar\omega}{2mc^2} \left(\frac{K}{\hbar\omega} \right)^2 \approx 0, \quad K \equiv (e/mc) \mathbf{p} \mathbf{A} - e^2 A^2 / 2mc^2, \quad (3.7a)$$

ahol K az elektron-fény kölcsönhatási energia. (3.7a) alapján világos, hogyha a fény intenzitása elég nagy akkor a $(K/\hbar\omega)^2$ arány $(\hbar\omega/2mc^2)$ kicsinységét kompenzálni tudja, vagyis (3.7) durva közelítésnek bizonyul. Következésképpen (3.6a) bal oldalának mindhárom tagját figyelembe kell venni (Bergou és Varró 1980b). Mielőtt (3.6a) egzakt megoldásával foglalkoznánk megjegyezzük, hogy ha (3.7) exponensének nevezőjében a (v_{\parallel}/c) Doppler-eltolódástól eltekintünk, akkor az így kapott (3.5) típusú hullámfüggvények ortogonális és teljes rendszert képeznek.

Térjünk most vissza a (3.6a) egyenlethez és az egyszerűség kedvéért használjunk monokromatikus cirkulárisan polarizált potenciált,

$$\mathbf{A} = A_0(\mathbf{e}_1 \cos \xi + \mathbf{e}_2 \sin \xi), \quad \xi = \omega(t - \mathbf{nr}/c). \quad (3.9)$$

(Ebben az esetben $A^2 = A_0^2 = \text{konstans}$.) Mivel f' és f'' együtthatói állandók, ezért az első deriváltat a következő helyettesítéssel kiküszöbölhetjük.

$$f(\xi) = \exp \left(-i \frac{2mc^2(1 - v_{\parallel}/c)}{\hbar\omega} \frac{1}{2} \xi \right) g(\xi). \quad (3.10)$$

Ezzel (3.6a-ból) g -re az alábbi Mathieu-egyenletet kapjuk

$$g''(z) + (a - 2q \cdot \cos 2z)g(z) = 0, \quad (3.10a)$$

ahol

$$a \equiv \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^2 \left[\left(1 - \frac{v_{\parallel}}{c} \right)^2 - v^2 \right], \quad (3.10b)$$

$$q \equiv - \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^2 v \left(\frac{v_{\perp}}{c} \right), \quad (3.10c)$$

$$v_{\perp} = \frac{p_{\perp}}{m}, \quad p_{\perp} \equiv [(e_1 \mathbf{p})^2 + (e_2 \mathbf{p})^2]^{1/2}, \quad (3.10d)$$

$$z \equiv \frac{1}{2} (\xi - \alpha), \quad (3.11)$$

$$\alpha \equiv \arctg [(e_2 \mathbf{p}) / (e_1 \mathbf{p})], \quad (3.12)$$

$v = (eA_0/mc^2)$ a már ismert intenzitásparaméter.

(3.10a) általános megoldása

$$g(z) = Ae^{-\mu z} \Phi(z) + Be^{\mu z} \Phi(-z) \quad (3.13)$$

alakban írható (Arscott 1964), ahol A és B konstansok, $\Phi(z)$ π periódusú függvény, és μ a karakterisztikus exponens, amely általában komplex szám. Ha μ valós része nem nulla, akkor $z \rightarrow \pm \infty$ esetén a (3.13) függvény divergál, tehát a fizikailag elfogad-

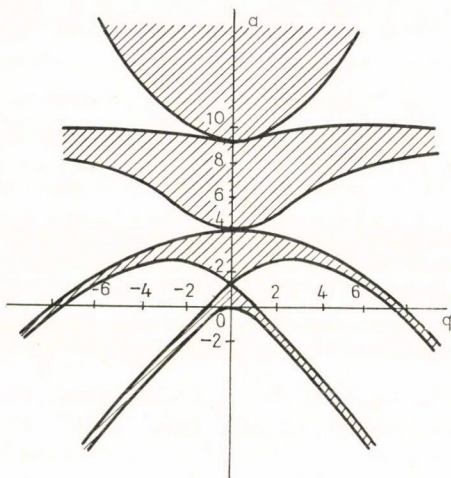
ható stacioner megoldásokra μ -nek tiszta képzetesnek kell lennie. A Mathieu-függvények elmélete szerint μ a következő saját értékegyenletből határozható meg

$$ch\pi\mu = 1 - 2\Delta(0) \sin^2 \frac{1}{2} \pi \sqrt{a}, \quad (3.14)$$

ahol $\Delta(0)$ tridiagonális végtelenrendű determináns,

$$\Delta(0) = \begin{vmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \gamma_{-2} & 1 & \gamma_{-2} & \\ & \gamma_0 & 1 & \gamma_0 \\ & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}, \quad \gamma_{2r} = \frac{q}{4r^2 - a} \quad (3.15)$$

(3.14) megoldásaként μ -t az a ((3.10b)) és q ((3.10c)) paraméterek függvényeként kapjuk meg. Bizonyos (a, q) párokra $\text{Re } \mu = 0$ (stabil megoldások), másokra $\text{Re } \mu \neq 0$ (instabil megoldások), tehát az (a, q) sík stabil és instabil tartományokra osztható, amint ezt az 1. ábrán láthatjuk.



1. ábra. A Mathieu-egyenlet stabilitás diagramja. A bevonalkázott tartományok stabilak, az (a, q) sík fennmaradó része instabil

Mivel a $\hat{p}_1 = \mathbf{e}_1 \hat{\mathbf{p}}$ és $\hat{p}_2 = \mathbf{e}_2 \hat{\mathbf{p}}$ operátorok a (3.4)-ben szereplő Hamilton-operátorral felcserélhetők, ezért a p_\perp impulzus komponens mozgásállandó és így (3.10c) szerint a q paraméter nem függ a rendszer dinamikájától. Az elektron-fény kölcsönhatás folyamán csak a $p_\parallel = \mathbf{n} \mathbf{p}$ komponens változhat. A stabilitás diagramról leolvasható, hogy adott q értékeknél a fizikailag megengedett a értékek sávokban helyezkednek el. Ez az optikailag indukált sávszerkezet.

Megjegyezzük, hogy hasonló struktúrájú sávszerkezetet talált Berson és Valdmanis (1973) két egymással szemben terjedő cirkuláris polarizált monokromatikus fényhullámban tartózkodó relativisztikus elektronokra, valamint Cronström és Noga (1977) és Becker (1977) refraktív közegben terjedő haladóhullámú elektromágneses

sugárzás és relativisztikus elektronok kölcsönhatása esetén (lásd még Becker, Meckbach és Mitter 1979 és Becker és Mitter 1979).

A hatodik fejezetben látni fogjuk, hogy a vákuumbeli haladó síkhullámokkal kölcsönható relativisztikus elektronok energiaparamétere folytonos spektrumú, és egzakt hullámfüggvényeik nemrelativisztikus közelítésben a (3.13) Mathieu-függvények helyett a (3.7) megoldásokba mennek át. Ennek figyelembevételével az általunk bemutatott sávszerkezet fizikai létezése erősen kérdéses. A sávszerkezethez a (3.6a) egyenlet egzakt megoldása segítségével jutottunk a (3.7) közelítés elvetése után. Eljárásunkat azzal indokoltuk, hogy (3.6a)-ban a második derivált elhagyásából a (3.7a) feltétel következik, amely elegendően nagy K kölcsönhatási energiánál nem teljesül. Egyszerűen belátható, hogy (3.7a) bal oldala $v^2(v/c)^2(mc^2/\hbar\omega)$ nagyságrendű,

másrészt (1.3c) szerint v a klasszikus elektron fénytérbeli oszcillációja sebességamplitúdójának és a fénysebességnek a hányadosa. Tehát az említett „elegendően nagy” kölcsönhatási energia valójában relativisztikus sebességnek felel meg ($v \sim 1$), ekkor viszont a Schrödinger-egyenlet nem alkalmazható. Ennek alapján a fenti sávszerkezet fizikai létezésének lehetőségét el kell vetnünk, s ugyanakkor a (3.13) egzakt megoldás helyett elegendő a (3.7) közelítő hullámfüggvényt használnunk.

3.2. Nemrelativisztikus elektronok többfotonos kényszerített fékezési sugárzása

Köztudott tény, hogy a sugárzási tér egyetlen módusával (vagy olyan módusok összességével, amelyek hullámvektora azonos irányú) kölcsönható elektron fotont nem abszorbeálhat és nem emittálhat. Ahhoz hogy ilyen reális abszorpció vagy emissziós folyamatok lejátszódjanak, egy harmadik testre van szükség. E fejezetben a harmadik test szerepét egy az origóban nyugvó végtelen nagy tömegű ion (vagy atom, molekula) játssza, amelynek az elektronra gyakorolt hatását a $V(\mathbf{r})$ sztatikus skalárpotenciállal jellemezzük. Feltesszük, hogy e potenciál az alkalmazott intenzív fény hullámhosszánaál lényegesen kisebb méretű tértartományban különbözik jelentősen zérustól

(pl. egy árnyékolt ion esetében $V(r) = \frac{e^{-r/d}}{r}$, ahol d a Debye-hossz, amely rendszerint sokkal kisebb az optikai hullámhosszánál). Ekkor az elektron szóródását a dipólközelítéssel kapott (3.3) bázisfüggvényekkel írhatjuk le. (A relativisztikus, dipólközelítésen túli általánosítást a 6. fejezet tartalmazza.) Monokromatikus, lineárisan polarizált fénnel való kölcsönhatás esetén ($\mathbf{A} = A_0 \mathbf{e} \cos \omega t$) (3.3) konkrét alakja

$$\varphi_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc\omega} \mathbf{p} \mathbf{e} \sin \omega t - \int_0^t d\tau \frac{e^2 A_0^2}{2mc^2} \cos^2 \omega \tau \right) \right]. \quad (3.16)$$

Az elektron Schrödinger-egyenlete

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.17)$$

melynek megoldását a következő alakban keressük (Bergou 1980)

$$\psi = \varphi_{\mathbf{p}_i} + \psi_K, \quad \psi_K = \int d^3p a_p(t) \varphi_p, \quad (3.18)$$

$\varphi_{\mathbf{p}_i}$ az elektron (3.16) típusú kezdeti állapota és a ψ_K korrekciót a (3.16) teljes rendszer szerint fejtettük ki. (3.18)-at (3.17)-be helyettesítve és csak a V -ben elsőrendű tagokat megtartva (ez a Born-közelítésnek felel meg) az $a_p(t)$ amplitúdókra az alábbi közönséges differenciálegyenletet kapjuk

$$i\hbar \frac{da_p}{dt} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} V(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p_i^2}{2m} t + i \frac{eA_0}{mc\hbar\omega} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}) \mathbf{e} \sin \omega t \right], \quad (3.19)$$

ahol

$$V(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}) = \int d^3r V(\mathbf{r}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \mathbf{r} \right] \quad (3.19a)$$

a háttérpotenciál Fourier-transzformáltja. A φ_p rendszer ortogonalitása következtében a φ_{p_f} végállapotú szórásfolyamat $(\varphi_{p_f}, \psi_K) \equiv T_{fi}$ mátrixeleme (3.18) szerint éppen $a_{p_f}(t)$. $t \rightarrow +\infty$ esetén

$$T_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p_f^2 - p_i^2}{2m} t + iz \sin \omega t\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} V(\mathbf{Q}), \quad (3.20)$$

$$\mathbf{Q} \equiv \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f, \quad z \equiv \frac{eA_0}{m\hbar\omega} \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\epsilon}. \quad (3.20a-b)$$

(3.20) kiértékelése céljából $\exp(iz \sin \omega t)$ -t az (1.37) Jacobi—Anger-formula szerint Fourier-sorba fejtjük, s ezután végezzük el az idő szerinti integrálást:

$$T_{fi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(n)}, \quad T_{fi}^{(n)} = -2\pi i \delta\left(\frac{p_f^2 - p_i^2}{2m} + \pi\hbar\omega\right) t_{fi}^{(n)}, \quad (3.21a)$$

ahol

$$t_{fi}^{(n)} \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} V(\mathbf{Q}) J_n(z) \quad (3.21b)$$

Megjegyezzük, hogy az időben periodikus külső elektromágneses tér jelenlétében szóródó elektron átmeneti amplitúdói mindig parciális amplitúdók inkoherens szuperpozíciójaként állíthatók elő (Bergou 1975). (3.21a) ennek az általános tételnek az érvényességét illusztrálja.

A (3.12a)-ban szereplő Dirac-delta a különböző rendű foton-abszorpciókra ($n < 0$) és emissziókra ($n > 0$) vonatkozó energia megmaradást fejez ki,

$$\frac{p_f^2}{2m} = \frac{p_i^2}{2m} - n\hbar\omega, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.21c)$$

(3.21b) ismeretében a megfelelő differenciális hatáskeresztmetszetek a szokásos módon számíthatók,

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} J_n^2(z) \frac{d\sigma_B}{d\Omega}, \quad \frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V(\mathbf{Q})|^2. \quad (3.22)$$

$(d\sigma_B/d\Omega)$ a $\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f$ folyamat Born-féle hatáskeresztmetszete.

A (3.22) eredményt sok szerző megkapta különböző módszereket használva (Bunkin és Fjodorov 1965, Bunkin, Kazakov és Fjodorov 1972, Faisal 1973, Gontier és Rahman 1974, Bergou 1976). Megjegyezzük, hogy cirkuláris polarizáció esetén ($\mathbf{A} = A_0(\boldsymbol{\epsilon} e^{-i\omega t} + \boldsymbol{\epsilon}^* e^{i\omega t})$) (3.22)-vel teljesen azonos struktúrájú hatáskeresztmetszete-t kapunk, a különbség annyi, hogy z (3.20b)-ben definiált alakja helyett

$$z \equiv 2 \frac{eA_0}{m\hbar\omega} |\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\epsilon}| \quad (3.22a)$$

szerepel a Bessel-függvények argumentumában. Alacsonyfrekvenciás közelítésben bebizonyítható, hogy

$$(d\sigma^{(n)}/d\Omega) = (p_f/p_i) J_n^2(z) (d\sigma_{el}/d\Omega) \quad (3.22b)$$

(Kroll és Watson 1973), ahol $(d\sigma_{el}/d\Omega)$ a lézerrény jelenléte nélkül végbemenő folyamat rugalmas szórás hatáskeresztmetszete. (3.22) szerint a szóródás a rugalmas szórás Born-féle keresztmetszetével és a $\frac{p_f}{p_i} J_n^2(z)$ rugalmatlanságot kifejező tényezővel jellemezhető. Kis intenzitások esetén ($z \approx 0$) $(d\sigma^{(n)}/d\Omega) = \delta_{n,0} (d\sigma_B/d\Omega)$, ugyanis $J_n(0) = \delta_{n,0}$. Az első fejezetben láttuk, hogy az intenzív Thomson-szórás hatáskeresztmetszete $\sigma_{Th} \sim r_0^2 \sim 10^{-25} \text{ cm}^2$ nagyságrendű, ugyanakkor (3.22) szerint egy Z töltésű ion esetében $d\sigma^{(n)}/d\Omega$ a kényszerített fékezés sugárzás esetében $\sigma_{el} \sim 10^9 (r_0 Z^{1/3})^2$ nagyságrendű lehet, tehát $\sigma_{el} \sim 10^9 \sigma_{Th}$. Ezek alapján nem véletlen, hogy a többfotonos szabad-szabad elektronátmenetek első kísérleti kimutatása kényszerített fékezés sugárzás esetén sikerült. Weingarsthofer és munkatársai (1977) 11 eV-os szabad elektronok argon atomokon való szóródását vizsgálták. A kölcsönhatási tartományt 200 μs kihagyásokkal 2 μs időtartamokra 10^9 W/cm^2 intenzitású CO_2 -lézerrel periódikusan megvilágították és elektronspektrométerrel analizálták a szóródott elektronok energiaeloszlását. Az találták, hogy a lézerrény hatására az $E_f = E_i + n\hbar\omega$ energiaértékek-nél az eloszlási görbén lokális maximumok jelennek meg, amint ez a 2. ábrán látható. Ezek a szimmetrikusan elhelyezkedő maximumok az egy, két stb. foton abszorbeált, ill. emittált elektronoktól erednek. A Bessel-függvények elméletéből jól ismert $\sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n^2(Z) = 1$ formula alapján (3.22b)-ből következik, hogy alacsony-frekvenciás esetben (amikor $z((3.20b))$ n -függésétől eltekinthetünk) érvényes a

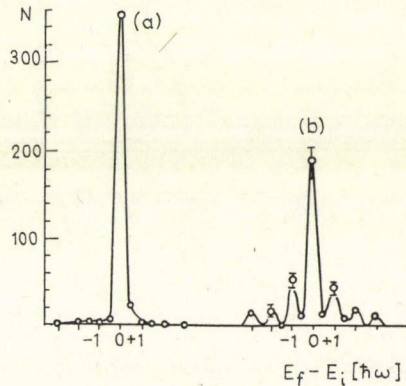
$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} \approx \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$$

összegszabály (Brown és Goble 1968, Jung 1980, Rosenberg 1979). A 2. ábra (a) és (b) görbéjét összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy a fenti összegszabályt a kísérletek — legalábbis közelítőleg — igazolják.

A már említett és a későbbi kísérletekben (Weingarsthofer és munkatársai 1979) is az alkalmazott lézer amplitúdója közel sem volt állandó. Krüger és Jung (1978) szerint a lézerimpulzusok időbeli lefutása a hatáskeresztmetszeteket erősen befolyásolhatja. $\mathbf{A} = \mathbf{E} A_0(t) \cos \omega t$ esetén ha $A_0(t)$ karakterisztikus ideje $(2\pi/\omega)$ -nál jóval nagyobb, akkor a szórás a következő átlaggal jellemezhetjük

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} \approx \frac{p_f}{p_i} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} R_n, \quad R_n \equiv \frac{1}{T} \int_0^T J_n^2(z(t)),$$

T a lézerimpulzus időtartama és $z(t)$ (3.20b)-ből $A_0 \rightarrow A_0(t)$ helyettesítéssel nyerhető. A kísérletekben előforduló $A_0(t)$ amplitúdó profilokra R_n 5-nél nagyobb n -ekre, már gyakorlatilag zérus. Ennek alapjánérthető, hogy miért nem tudtak ötörendűnél magasabbrendű folyamatokat észlelni.



2. ábra. A lézerrény nélkül (a) és annak jelenlétében (b) atomokon szóródó elektronok energiaspektruma. N = a szórt elektronok 600 2 μs -os lézerimpulzus alatt detektált gyakorisága, $E_i - E_f$ = az elektronok energianyeresége $\hbar\omega$ egységekben. A szóródási szög a kísérletben 153° volt. (Weingarsthofer és munkatársai (1977) nyomán.)

Megjegyzés: A (3.21c) energiamérleg interpretálásakor fotonok abszorpciójáról és emissziójáról kezdtünk beszélni, holott az elektromágneses sugárzást klasszikus vektorpotenciállal írtuk le. A (3.21c) eredmény valójában az elektron kvantummechanika rezonanciáiról ad számot, tehát fotonokkal való értelmezése redundáns. (Teljesen hasonló a helyzet a jól ismert felületi fotoelektromos effektus esetében is (lásd pl. Mandel 1976).) A (3.21c) típusú szemiklasszikus eredményeket mindezek ellenére nyugodt lelkiismerettel magyarázhatjuk fotonok segítségével, amint ezt a következőkben megmutatjuk.

4. Nemrelativisztikus szabad elektron kölcsönhatása kvantált sugárzási térrel

Jelen fejezetben a nemrelativisztikus szabad elektronok kvantált sugárzási térrel való kölcsönhatását vizsgáljuk dipólközelítésben.

Az első részben megadjuk az „elektron + kvantált e. m. módus” rendszer Schrödinger-egyenletének stacionárius és időfüggő megoldásait és ezek segítségével elemezzük a rendszer néhány statisztikus tulajdonságát. A második részben meghatározzuk a kvantált sugárzás jelenlétében valamilyen sztatikus potenciálon való elektron szóródás egzakt differenciális hatáskeresztmetszetét, s a kapott eredményt összevetjük az előző fejezetben szemiklasszikus módszerrel kiszámolt (3.22) hatáskeresztmetszetekkel. A szórásfolyamat energiamérlegének analízise során kitűnik, hogy a (3.21c) rezonanciafeltétel értelmezéséhez az előző fejezetben használt intuitív foton kép lényegében korrekt.

4.1. A „nemrelativisztikus szabad elektron + kvantált e. m. módus” rendszer állapottai

Az „elektron + kvantált e. m. módus” rendszer Hamilton-operátora nemrelativisztikus esetben

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + H_f, \quad (4.1)$$

amely természetes módon három részre bontható

$$H = H_e + H_f + H_I, \quad (4.1a)$$

ahol

$$H_e = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad H_f = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right), \quad H_I = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2. \quad (4.1b)$$

H_e és H_f az elektron, ill. a tekintett ω frekvenciájú e. m. módus energia operátorai, és H_I a kölcsönhatást írja le. Az \mathbf{A} vektorpotenciál Schrödinger-képben dipólközelítés esetén a következő alakú

$$\mathbf{A} = \alpha (\mathbf{E} a + \mathbf{E}^* a^+), \quad \alpha \equiv c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2}. \quad (4.1c)$$

V a kvantálási térfogat, \mathbf{E} polarizációs egységvektor, és az a, a^+ amplitúdók az $[a, a^+] = 1$ felcserélési összefüggésnek tesznek eleget. Cirkulárisan polarizált módus esetében

$$\mathbf{E} \mathbf{E} = \mathbf{E}^* \mathbf{E}^* = 0, \quad \mathbf{E}^* \mathbf{E} = 1, \quad (4.2)$$

s ezért a H_I -ben szereplő A^2 -et tartalmazó tag beleolvasztható a H_f módus energiába,

$$H_f + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 = \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right), \quad (4.2a)$$

ahol

$$\Omega = \omega \left(1 + \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \right), \quad \omega_p^2 \equiv \frac{4\pi e^2}{mV}. \quad (4.2b)$$

Megjegyezzük, hogy ω_p formálisan azonosítható az $(1/V)$ sűrűségű elektrongáz plazmafrekvenciájával. (4.2a) és (4.1a—b—c) figyelembevételével a rendszer teljes Hamilton-operátora cirkulárisan polarizált módus esetében a következő alakra hozható

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} \hat{\mathbf{p}}(\boldsymbol{\epsilon} a + \boldsymbol{\epsilon}^* a^+). \quad (4.3)C$$

Lineáris polarizációnál $\boldsymbol{\epsilon}$ valós és $\boldsymbol{\epsilon}^2 = 1$, könnyen belátható, hogy ekkor

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} \hat{\mathbf{p}}\boldsymbol{\epsilon}(a + a^+) + \frac{e^2 \alpha^2}{2mc^2} (a^2 + a^{+2}). \quad (4.4)L$$

A rövidség kedvéért itt csak a (4.3)C Hamilton-operátor diagonalizálásával foglalkozunk részletesen, mivel ez (4.4)L-el ellentétben nem tartalmaz a^2 -t, ill. a^{+2} -tel arányos kölcsönhatási tagot.

A (4.3)C energiaoperátor nem függ az időtől, következésképpen az elektron-foton rendszer

$$H\psi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \quad (4.5)$$

Schrödinger-egyenletének vannak stacionárius megoldásai:

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \varphi, \quad (4.5a)$$

ahol φ az alábbi energia saját értékegyenletet elégíti ki

$$H\varphi = E\varphi. \quad (4.5b)$$

Mivel esetünkben H az elektronkoordinátáktól független ezért φ -t egy impulzussajátállapot és egy módusállapot szorzataként vehetjük fel,

$$\varphi = |\mathbf{p}\rangle |\chi\rangle \quad (4.5c)$$

(4.5b)-ből H (4.3)C-ben megadott konkrét alakját figyelembe véve $|\chi\rangle$ -re a következő egyenletet kapjuk

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\alpha}{mc} \mathbf{p}(\boldsymbol{\epsilon} a + \boldsymbol{\epsilon}^* a^+) \right] |\chi\rangle = E|\chi\rangle. \quad (4.6)$$

A (4.6)-ban szereplő kölcsönhatási tagot a második fejezetben már látott (2.5c) eltolási transzformációk segítségével küszöbölhetjük ki (Bergou és Varró 1981a). Megje-

gyezzük, hogy ugyanilyen típusú transzformációkat használt Bloch és Nordsieck (1937) az infravörös divergenciával foglalkozó alapvető cikkükben az elektron-foton kölcsönhatási tagok eliminációjához. (4.6) megoldása érdekében vezessük be először a

$$D_{\sigma} = e^{\sigma^* a - \sigma a^*} \quad (4.7)$$

operátort, ahol σ később meghatározandó paraméter. Ha (4.6)-on végrehajtunk egy D_{σ} generátorú unitér transzformációt, akkor D_{σ} (2.5b) eltolási tulajdonságainak felhasználásával a következő egyenletet nyerjük

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} + |\sigma|^2 \right) + \left(\hbar\Omega\sigma^* - \frac{e\alpha}{mc} \mathbf{p} \mathbf{E} \right) a + \right. \\ \left. + \left(\hbar\Omega\sigma - \frac{e\alpha}{mc} \mathbf{p} \mathbf{E}^* \right) a^+ - \frac{e\alpha}{mc} (\mathbf{p} \mathbf{E} \sigma + \mathbf{p} \mathbf{E}^* \sigma^*) \right] D_{\sigma}^{-1} |\chi\rangle = E D_{\sigma}^{-1} |\chi\rangle. \quad (4.8a)$$

Ezek után válasszuk σ -t úgy, hogy (4.8a) bal oldalán a és a^+ együttthatói eltűnjenek, azaz legyen

$$\sigma = \frac{e\alpha}{m\hbar\Omega} \mathbf{p} \mathbf{E}^*. \quad (4.8b)$$

Ekkor (4.8a) az alábbi egyenletre redukálódik

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} - |\sigma|^2 \right) \right] D_{\sigma}^{-1} |\chi\rangle = E D_{\sigma}^{-1} |\chi\rangle. \quad (4.8c)$$

Világos, hogy (4.8c) a

$$D_{\sigma}^{-1} |\chi\rangle = |n\rangle \quad (a^+ a |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.8d)$$

szám saját állapotokkal és az

$$E = E(\mathbf{p}, n) \equiv \frac{p^2}{2m} + \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} - |\sigma|^2 \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.8e)$$

energia saját értékekkel kielégíthető. Eredményeinket összegyűjtve (4.5a—c), valamint (4.8d—e) alapján a (4.5) Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásait a következő alakban állíthatjuk elő

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(\mathbf{p}, n)t} |\mathbf{p}\rangle D_{\sigma} |n\rangle. \quad (4.9)$$

D_{σ} unitaritása miatt a (4.9) megoldásrendszer teljes és ortonomált.

Mivel D_{σ} (2.5d) szerint a σ paraméterű koherens állapot keltőoperátora, ezért (4.8e) és (4.9) alapján megállapíthatjuk, hogy rögzített p esetén a rendszer legalacsonyabb energiájú állapotában ($n=0$) az e. m. módus koherens állapotban van.

Helykímélés céljából itt csak bizonyítás nélkül közöljük, hogy a lineáris polarizációjú módushoz tartozó (4.4)L Hamilton-operátor a

$$C_{\theta} = e^{-\frac{\theta}{2} (a^{+2} - a^2)}, \quad \theta = \frac{1}{2} \operatorname{arth} \frac{e^2 \alpha^2}{mc^2 \hbar \Omega} \quad (4.10)$$

Bogoljubov-transzformációval (Tabane 1973)

$$H' = C_{\Theta}^{-1} H C_{\Theta} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \text{sech } 2\Theta - \frac{e\alpha}{mc} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{\epsilon} (a + a^+) e^{-\Theta} \quad (4.10a)$$

alakra hozható. (4.10a) ugyanolyan struktúrájú, mint (4.3)C, tehát diagonalizálása az előbb bemutatott D-transzformációs módszerrel történhet (a részleteket illetően lásd Bergou és Varró 1981a). Mielőtt a (4.9) stacionárius állapotokban szereplő $D_{\sigma}|n\rangle$ típusú módusállapotok statisztikus tulajdonságainak elemzésébe belekezdennénk röviden megvizsgáljuk a (4.5) egyenlet időfüggő megoldásait is cirkulárisan polarizált módus esetében. Első lépésként vegyük fel $\psi(t)$ -t a következő alakban:

$$\psi(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\Omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right] t \right\} \varphi(t). \quad (4.11)$$

(4.11) (4.5)-be való behelyettesítése után $\varphi(t)$ -re az alábbi egyenletet kapjuk

$$\hat{k}(t)\varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}, \quad (4.11a)$$

ahol

$$\hat{k}(t) \equiv -\frac{e\alpha}{mc} \hat{\mathbf{p}} (\mathbf{\epsilon} a e^{-i\Omega t} + \mathbf{\epsilon}^* a^+ e^{i\Omega t}). \quad (4.11b)$$

(4.11a) megoldása érdekében ugyanazokat a fogásokat kell alkalmaznunk mint a második fejezet (2.1) egyenlete esetében ezért itt csak a végeredményt közöljük:

$$\varphi(t) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t g(\tau) d\tau \right) D_{\sigma(t)} \varphi(t_0). \quad (4.12)$$

(4.12)-ben $\varphi(t_0)$ a kezdeti állapot (kölcsonhatási képben) és

$$D_{\sigma(t)} \equiv e^{\sigma(t)a^+ - \sigma^*(t)a} \quad (4.12a)$$

$$\sigma(t) \equiv \frac{e\alpha}{m\hbar\Omega} \mathbf{\epsilon}^* \hat{\mathbf{p}} (e^{i\Omega t} - e^{i\Omega t_0}), \quad (4.12b)$$

$$g(t) \equiv \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \left[\int_{t_0}^t \hat{k}(\tau) d\tau, \hat{k}(t) \right]. \quad (4.12c)$$

$g(t)$ bozonoperátorokat nem tartalmaz. (4.12) alapján egyszerűen belátható, hogy ha $\varphi(t_0) = |\mathbf{p}_0\rangle |0\rangle$ a vákuumban terjedő szabad elektront reprezentál, akkor $\varphi(t)$

fotonokat leíró része $\sigma(t) = \frac{e\alpha}{m\hbar\Omega} \mathbf{p}_0 \mathbf{\epsilon}^* (e^{i\Omega t} - e^{i\Omega t_0})$ paraméterű koherens állapot

lesz. Következésképpen — ezen egyszerű modell szerint — a szabad elektron saját-terének hosszúhullámú komponensei koherens állapotban vannak. Ha $\varphi(t_0) = |\mathbf{p}_0\rangle |\alpha\rangle$, ahol $|\alpha\rangle$ koherens állapot, akkor a D operátorok (2.5c) szorzási szabálya segítségével egyszerűen belátható, hogy $\varphi(t)$ (4.12) alakjában a kvantált módot leíró rész $\alpha + \sigma(t)$ paraméterű koherens állapot lesz. Ha azonban az elektron kezdetben szuperponált állapotban van, akkor $|\alpha\rangle$ -ból már nem feltétlenül alakul ki koherens

állapot, ez a különbség a kvantummechanikai és klasszikus elektronáramok által generált sugárzási tér között.

Térjünk most rá a $D_\sigma|n\rangle$ típusú állapotok statisztikus tulajdonságainak vizsgálatára ($|n\rangle$ számsajátállapot). $D_\sigma|n\rangle$ kifejezhető Fock-állapotok szerint,

$$D_\sigma|n\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} c_r|r\rangle, \quad a^+a|r\rangle = r|r\rangle, \quad (4.13)$$

ahol

$$c_r = \langle r|D_\sigma|n\rangle. \quad (4.13a)$$

Mivel D_σ unitér, ezért a $|c_r|^2$ valószínűségeloszlás normált. c_r -ek konkrét alakját a Baker—Campbell—Hausdorff-formula segítségével kaphatjuk meg, amely szerint ha az A és B operátorok kommutátorukkal felcserélhetők, akkor érvényes a következő összefüggés

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}.$$

D_σ ennek figyelembevételével $e^{\sigma a^+} e^{-\sigma^* a} e^{-1/2|\sigma|^2}$ alakba írható ezután az $(\langle r|e^{\sigma a^+}(e^{-\sigma^* a}|n\rangle))$ mátrixelemek már könnyen meghatározhatók:

$$c_r = \langle r|D_\sigma|n\rangle = \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}|\sigma|^2} \sqrt{r!n!} \sigma^{r-n} \sum_{l=0}^n \frac{(-|\sigma|^2)^l}{(r-n+l)!(n-l)!l!}, & r > n \\ e^{-\frac{1}{2}|\sigma|^2} \sqrt{r!n!} (-\sigma^*)^{n-r} \sum_{l=0}^r \frac{(-|\sigma|^2)^l}{(n-r+l)!(n-l)!l!}, & r < n. \end{cases} \quad (4.14)$$

(4.14) jobb oldalai általánosított Laguerre-polinomokkal (Abramowitz és Stegun 1964) arányosak,

$$c_r = \langle r|D_\sigma|n\rangle = \begin{cases} \left(\frac{n!}{r!}\right)^{1/2} \sigma^{r-n} L_n^{(n-r)}(|\sigma|^2) e^{-\frac{1}{2}|\sigma|^2}, & r > n \\ \left(\frac{r!}{n!}\right)^{1/2} (-\sigma^*)^{n-r} L_r^{(r-n)}(|\sigma|^2) e^{-\frac{1}{2}|\sigma|^2}, & r < n. \end{cases} \quad (4.14a)$$

A $|c_r|^2$ eloszlás momentumai a (4.14a), konkrét alakok ismerete nélkül is meghatározhatók. A fotonszám várható értéke (2.5b) alapján

$$\langle r \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} |c_r|^2 r = \langle n|D_\sigma^{-1} a^+ a D_\sigma|n\rangle = n + |\sigma|^2. \quad (4.15)$$

Az átlagos négyzetes eltérés

$$\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = |\sigma|^2 (2n + 1). \quad (4.16)$$

Ha a (4.12) állapotokat tekintjük a $\varphi(t_0) = |p\rangle|n\rangle$ esetben, akkor (4.15) és (4.16) alapján megállapíthatjuk, hogy egy kezdetben éles fotoneloszlás ($c_r(t_0) = \delta_{r,n}$) az elektronokkal való kölcsönhatás következtében szétfolyik egy $n + |\sigma|^2$ középpontú és $|\sigma|(2n+1)^{1/2}$ félszélességű eloszlássá, amely n -re vonatkozóan aszimmetrikus. Ha $n=0$, akkor a módus koherens állapotba kerül, amelyben a fotonszám $|\sigma|^2$ paraméterű Poisson-eloszlást követ (lásd a (2.5d—e—f—g) képleteket). A másik szélsőséges esetben a kezdeti n fotonszám nagyon nagy. Ekkor c_r -ek (4.14a) kifejezéseit a Laguerre-

polinomokra vonatkozó Hilb-formula segítségével értékelhetjük ki. Eszerint (Erdélyi 1953)

$$x^{m/2} L_n^{(m)}(x) e^{-x/2} = \frac{(n+m)!}{\left(n + \frac{m+1}{2}\right)^{m/2} n!} J_m[(vx)^{1/2}] + O(n^{m/2-3/4}), \quad (4.17)$$

$$v \equiv 4n + 2m + 2.$$

J_m m -edrendű Bessel-függvény. (4.14a) és (4.17) alapján c_r -eket $r > n$ esetben így írhatjuk

$$c_r = \langle r | D_\sigma | n \rangle = e^{imx} \left[\left(1 + \frac{1}{n}\right) \dots \left(1 + \frac{m}{n}\right) \right]^{1/2} \left(\frac{2n}{2n+m+1} \right)^{m/2} J_m[(vx)^{1/2}] + \frac{O(n^{-3/4})}{\left[\left(1 + \frac{1}{n}\right) \dots \left(1 + \frac{m}{n}\right) \right]^{1/2}}, \quad (4.18)$$

ahol

$$m \equiv r - n > 0, \quad x \equiv |\sigma|^2, \quad v \equiv 4n + 2m + 2, \quad \chi \equiv \arg \sigma. \quad (4.18a)$$

Hasonló formula érvényes, ha $r < n$. σ (4.8b) (vagy (4.12b)) definíciós egyenletéből látszik, hogy (mivel (4.1c) szerint $\alpha \equiv c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2}$) $|\sigma|^2$ arányos $(1/V)$ -vel; a kvantálási térfogat reciprokával. (4.18)-ban tehát a Bessel-függvény argumentuma lényegében arányos a fotonsűrűség (n/V) várható értékével. (4.18) segítségével $c_{n \pm m}$ -et egzaktul ki tudjuk értékelni az $n \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ határesetben, ha a $\varrho \equiv (n/V)$ fotonsűrűséget és $m = |r - n|$ -et a határértékképzés során állandónak tartjuk.

$$\lim_{n, V \rightarrow \infty} c_{n \pm m} = e^{\pm imx} J_{\pm m}(|\zeta|), \quad (4.19)$$

$$\varrho \equiv (n/V), \quad m \text{ rögzített,}$$

ahol

$$\zeta \equiv 2 \frac{ea_0}{mc\hbar\omega} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}^*), \quad a_0 \equiv \frac{c}{\omega} (2\pi\varrho\hbar\omega)^{1/2}, \quad \chi = \arg \zeta. \quad (4.19a-b)$$

Megjegyezzük, hogy az $\mathbf{A} = a_0(\mathbf{E}e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^*e^{i\omega t})$ klasszikus vektorpotenciállal jellemzett elektromágneses tér energiasűrűsége (4.19b) alapján éppen $\varrho\hbar\omega$. A fenti \mathbf{A} vektorpotenciállal az előző fejezet (3.16) típusú hullámfüggvényei az

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{2ea_0}{mc\omega} |\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}| \sin(\omega t - \chi) \right\}$$

modulációs faktort tartalmaznak (ne feledjük, hogy most $\mathbf{A}^2 = a_0^2 = \text{const.}$), amelynek Fourier-együtthatói az (1.37) Jacobi—Anger-formula szerint pontosan megegyeznek a (4.19) határértékekkel. Ezzel bebizonyítottuk, hogy a (3.16) szemiklasszikus állapotokból számolt energiaspektrum megegyezik a nagy n betöltési számokkal paraméterezett $D_\sigma|n\rangle$ állapotokból számítható foton spektrummal.

4.2. Többfotonos kényszerített fékezési sugárzás kvantált elektromágneses térben

A harmadik fejezetben kiszámítottuk egy $V(\mathbf{r})$ háttérpotenciál hatására intenzív fény jelenlétében bekövetkező elektronszóródás differenciális hatáskeresztmetszetét. $V(\mathbf{r})$ -t Born-közelítésben vettük figyelembe, míg az elektron lézerfényvel való kölcsönhatását tetszőleges rendben tárgyalhattuk, mivel a perturbációs számításához a (3.16) szemiklasszikus bázisfüggvényeket használtuk. Megállapítottuk, hogy az átmeneti amplitúdó végtelen sok parciális amplitúdó inkoherens szuperpozíciójaként állítható elő (lásd (3.21a)-t), s minden egyes ilyen parciális amplitúdó a (3.21c) rezonanciafeltételt kielégítő egyedi szórásfolyamathoz tartozik. A

$$\frac{p_f^2}{2m} = \frac{p_i^2}{2m} - n\hbar\omega, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.21c)$$

rezonanciafeltétel értelmezésekor azt állítottuk, hogy tulajdonképpen n foton abszorpciójához, ill. emissziójához tartozó energiamegmaradást fejez ki, holott a lézerfényt klasszikus vektorpotenciállal jellemeztük. Úgy érezzük, hogy ez a szemiklasszikus alapokon nyugvó intuitív foton-kép mélyebb megalapozásra szorul, s ezért a többfotonos kényszerített fékezési sugárzást kvantált lézerfényvel kölcsönható elektronok esetében is megvizsgáljuk (Bergou és Varró 1981a). E program végrehajtásának egy másik fontos motívuma az, hogy a szórásfolyamat során bekövetkező móduskiürülést (feltöltődést) is le szeretnénk írni, s ehhez a szemiklasszikus elméletben használt külső tér közelítés per. def. nem alkalmas.

A többfotonos kényszerített fékezési sugárzás tárgyalásához most a (4.9) stationárius bázisállapotokat használjuk. A $V(r)$ potenciál hatására a

$$|\psi_i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(\mathbf{p}_i, n_i)t} |\mathbf{p}_i\rangle D_{\sigma_i} |n_i\rangle \quad (4.20a)$$

kezdeti és

$$|\psi_f\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(\mathbf{p}_f, n_f)t} |\mathbf{p}_f\rangle D_{\sigma_f} |n_f\rangle \quad (4.20b)$$

végállapotok közötti átmenet amplitúdója Born-közelítésben

$$T_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-a}^{\infty} \langle \psi_f | V(\mathbf{r}) | \psi_i \rangle dt. \quad (4.21a)$$

A (4.21a)-ban kijelölt idő szerinti integrálás elvégzése után T_{fi} -re következő kifejezést kapjuk

$$T_{fi} = -2\pi i \delta[E(\mathbf{p}_f, n_f) - E(\mathbf{p}_i, n_i)] \langle \mathbf{p}_f | V(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_i \rangle \langle n_f | D_{\sigma_f} D_{\sigma_i} | n_i \rangle. \quad (4.21b)$$

A (4.21b)-ben szereplő Dirac-delta (4.8e) alapján az alábbi energiamegmaradási törvényt fejezi ki

$$\frac{p_f^2}{2m} + \hbar\Omega(n_f - |\sigma_f|^2) = \frac{p_i^2}{2m} + \hbar\Omega(n_i - |\sigma_i|^2). \quad (4.21c)$$

Mivel az e. m. módusnak sem a kezdeti sem a végállapota nem fotonszám sajátállapot, ezért (4.21c)-t nem interpretálhatjuk úgy, hogy a szórásfolyamat során a módus fotontartalma n_i -ről n_f -re változott, azonban a megfelelő fotonszám várható értékekre (4.15) szerint az állítás már lényegében igaz.

A (4.21b) átmeneti amplitúdó felhasználásával a folyamat differenciális hatáskeresztmetszete a szokásos módon kiszámítható a következő eredménnyel

$$\frac{d\sigma^{(\pm l)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} |M_{\pm l}(n_i)|^2 \frac{d\sigma_B}{d\Omega}, \quad (4.22)$$

ahol

$$M_{\pm l}(n_i) \equiv \langle n_i \pm l | D_{-\sigma_f} D_{\sigma_i} | n_i \rangle, \quad l \equiv |n_f - n_i|. \quad (4.22a)$$

(4.22)-ben $(d\sigma_B/d\Omega)$ a megfelelő Born-féle keresztmetszet, amelyet (3.22)-ben már definiáltunk. $M_{\pm l}(n_i)$ a D -operátorok (2.5c) szorzási tétele alapján az alábbi alakra hozható

$$M_{\pm l}(n_i) = \langle n_i \pm l | D_{\tau} | n_i \rangle e^{i \operatorname{Im}(\sigma_f \sigma_i^*)}, \quad \tau \equiv \sigma_i - \sigma_f = \frac{e\alpha}{m\hbar\Omega} \mathbf{E}^*(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \quad (4.22b)$$

Amint azt a fejezet első részében láttuk ((4.14a)) az $\langle r | D_{\tau} | n \rangle$ típusú mátrixelemet általánosított Laguerre-polinomokkal fejezhetők ki, s így pl. $n_f > n_i$ esetben

$$M_l(n_i) = \left(\frac{n_i!}{(n_i + l)!} \right)^{1/2} \tau^l L_{n_i}^{(l)}(|\tau|^2) \exp \left[-\frac{1}{2} |\tau|^2 + i \operatorname{Im}(\sigma_f \sigma_i^*) \right], \quad n_f > n_i. \quad (4.23)$$

A (4.17) Hilb-féle képletet használva (4.19) bizonyításához teljesen hasonlóan belátható, hogy az $M_{\pm l}(n_i)$ mátrixelemek $n_i, V \rightarrow \infty$ határesetben (V a kvantálási térfogat) a következőképpen viselkednek

$$\lim_{n_i, V \rightarrow \infty} M_{\pm l}(n_i) = J_{\pm l}(|Z|) e^{\pm i\chi}, \quad (4.24a)$$

$$\varrho \equiv (n_i/V), \quad l \text{ rögzített},$$

ahol

$$Z \equiv 2 \frac{ea_0}{m\hbar\omega} \mathbf{E}^*(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f), \quad a_0 \equiv \frac{c}{\omega} (2\pi\varrho\hbar\omega)^{1/2}, \quad \chi \equiv \arg Z, \quad (4.24b)$$

és J_l l -edrendű Bessel-függvény. (4.24a) figyelembevételével megállapíthatjuk, hogy ha a kezdeti fotonszám várható értéke igen nagy ($n_i \gg 1$) és ha az e. m. módus kiürüléséből (feltöltődéséből) eltekinthetünk ($n_i \gg |l|$), akkor (4.22) jó közelítéssel ekvivalens az alábbi formulával

$$\frac{d\sigma^{(\pm l)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} J_l^2(|Z|) \frac{d\sigma_B}{d\Omega}, \quad (4.25)$$

amely formailag azonos a (3.22) szemiklasszikus eredménnyel. Ha z (3.20b) definíció szerint egyenletében a klasszikus vektorpotenciál A_0 amplitúdóját a (4.24b)-ben szereplő a_0 -al helyettesítjük akkor (3.22) (4.25)-tel teljesen megegyezik.

Ha a szórásfolyamat során a módus kiürülése (feltöltődése) számottevő, akkor a szemiklasszikus módszer nem használható és a (3.22), ill. (4.25) közelítő képletek — a (4.22) exakt eredménnyel ellentétben — elvesztik érvényességüket. Épp ezért nem tudunk egyetérteni *Osbornnal* (1972), aki a szabad elektrongáz nemlineáris fékezési sugárzás közben bekövetkező energia elnyelésének tárgyalása során a lehetséges foton abszorpciós és emissziós folyamatok mindegyikét ($n_f = 0, 1, 2, \dots$) a csak szemiklasszikus határesetben érvényes (4.25) differenciális hatáskeresztmetszettel

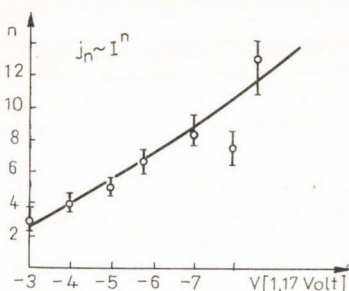
vette figyelembe. Például teljes kiürülés esetén ($l=n_i$) $Z=2|\tau|\sqrt{l}$, s ekkor $|J_l(2|\tau|\sqrt{l})|$ (közelítő) és $(|\tau|^2/l!)$ (pontos) hányadosának alsó határa $(|\tau|\sqrt{l}/2)^l$ -nel becsülhető. Nagy kezdeti intenzitásoknál ($l \gg 1$) ez a kifejezés divergál, tehát a szemiklasszikus közelítés ebben az esetben nem alkalmazható.

5. Elektron-elektron szórás intenzív fény jelenlétében

Jelen fejezetben először röviden áttekintjük a szabad elektronok fényabszorpciójával kapcsolatos kísérleti eredményeket. Ezután analitikus alakot adunk meg a lézérfényben lezajló nemrelativisztikus elektron-elektron szórásról leíró effektív potenciálra, amely számot ad a lézérfényben levő elektronok közötti (több kutató által már régóta sejtett) vonzásról. Megvizsgáljuk a rugalmas szórás esetében a szokásos Rutherford-rezonancia mellett fellépő ún. belső rezonanciákat is.

Ismeretes, hogy a sugárzási tér egy módusával kölcsönható szabad elektron fotont nem abszorbeálhat és nem emittálhat egy harmadik test jelenléte nélkül, ugyanis az ilyen hipotetikus folyamatok esetében az energia- és impulzusmegmaradást kifejező mérlegegyenletek ellentmondanak egymásnak. A harmadik test szerepét egy ion (atom) vagy egy másik e. m. módus vagy akár egy másik elektron is játszhatja. Az e három esetnek megfelelő folyamatok rendre a kényszerített fékezési sugárzás, a Compton-féle szórás és az e-e szórás monokromatikus elektromágneses sugárzásban. Mielőtt az utóbbi folyamat elméleti leírásába belekezdenénk, essék néhány szó a szabad elektronok fényabszorpciójával kapcsolatos kísérletekről.

Az elektronok többfotonos szabad-szabad átmeneteit — amint azt már a harmadik fejezetben is említettük — először Weingartshofer és munkatársai mutatták ki kísérletileg monoenergetikus elektronnyaláb argon atomnyalábon lézérfény jelenlétében történő szóródásának vizsgálatával. Ebben a kísérletben az elektron-atom ütközések játszották a lényeges szerepet, tehát a domináns folyamat nyilvánvalóan a kényszerített fékezési sugárzás volt. Egy másik alapvető kísérletben (Farkas 1977, Lompré és munkatársai 1979) fűtött katódból kilépő 10^{-2} eV átlagos termikus energiájú elektronokból álló gázt világítottak meg nagy intenzitású Nd lézerral ($I \sim 10$ GW, $\hbar\omega \sim 1,17$ eV) és mérték a katódhoz képest negatív feszültségű fémhálón átjutó elektronok áramát. Azt tapasztalták, hogy a lézérfény hatása nélkül a több Voltos ellenfeszültséget legyőzni képtelen elektronok a lézer bekapcsolása után, fotonabszorpciók következtében, már át tudtak hatolni a fémhálón, s hogy a háló mögött mért j_n elektronáram a fényintenzitás n -edik hatványával arányos (n a folyamat rendje), amint ez a 3. ábrán látható.



3. ábra. A többfotonos fényabszorpció rendjének (n) az ellenfeszültségtől (V) való függése (Farkas 1977 nyomán). j_n az észlelt elektronáram, I az alkalmazott lézer intenzitása

A kísérlet eredményének értelmezésére a következő lehetőségek kínálkoznak:

1. Az elektrongázt tartalmazó vákuumkamrában visszamaradt szennyező atomok hatására az elektronok kényszerített inverz fékezési sugárzás révén $n\hbar\omega \sim n \times (1,17 \text{ eV})$ energiát vehettek fel a lézérfényből. (A kapott n -hatvány törvény a (3.22a)

hatáskeresztmetszet-formulából dedukálható, mivel az idézett kísérletben $J_n^2(z)$ jól közelíthető $\left(\frac{z}{2}\right)^{2n} / (n!)^2 \sim I^n$ -el (Lompré és munkatársai 1979).

2. A szabad elektronok energianyereségének a több fotonos Compton-szórás kísérő visszalökődés a forrása (Körmendi 1977, 1980). Egyszerűen belátható azonban, hogy még ideális esetben is (visszaszórás) a visszalökődési energia csak akkor érheti el a $\hbar\omega$ értéket, ha az elektronról visszaszóródott fotonok száma $N \sim \left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{1/2}$. Optikai frekvenciáknál $N \sim 500$, tehát legalább 500-ad rendű folyamatok végbemenetelével kell számolnunk, viszont ezt a rendekre vonatkozó mérési eredmények nem támasztják alá.

3. Harmadik lehetőségként említjük, hogy ha a kölcsönhatási tartományban olyan jó a vákuum, hogy a szennyezések hatásától gyakorlatilag eltekinthetünk, akkor elektron-elektron szórás következtében még mindig végbemehet reális foton-abszorpció. Alább megmutatjuk, hogy az n -hatvány törvény ebben az esetben is érvényes.

Az 1-es és 3-as magyarázatok között úgy dönthetnénk, hogy az elméletből adódó hatáskeresztmetszeteket összevetnénk a kísérleti értékekkel amelyek azonban az eddigi kísérletekből nem állapíthatók meg.

A bevezetés után most rátérünk az intenzív fény jelenlétében lezajló elektron-elektron szórás elméleti vizsgálatára. E folyamatot először Oleinik (1967a, b), majd Bös és munkatársai (1979a, b) tanulmányozták Dirac-elektronok esetében. Mivel eredményeik meglehetősen bonyolultak (és impliciték is), és pl. Bös és munkatársai a kinetikát csak nemrelativisztikus határesetben tudták kiértékelni, ezért úgy érezzük, hogy szükség van a probléma konzekvens nemrelativisztikus tárgyalására is (Bergou, Varró és Fjodorov 1981a—b).

A két elektronból álló rendszer nemrelativisztikus Hamilton-operátora az \mathbf{A} vektorpotenciállal jellemzett külső monokromatikus síkhullám térben

$$H = H_0 + V \quad (5.1a)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_1 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi_1) \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_2 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\xi_2) \right)^2 + V, \quad (5.1a)$$

ahol

$$\mathbf{A}(\xi_{1,2}) = A_0(\mathbf{e}_1 \cos \xi_{1,2} + \mathbf{e}_2 \sin \xi_{1,2}), \quad \xi_{1,2} = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{1,2}, \quad (5.1b)$$

\mathbf{e}_1 és \mathbf{e}_2 egymásra és a \mathbf{k} hullámvektorra merőleges polarizációs egységvektorok (az egyszerűség kedvéért cirkuláris polarizációt használunk, mert ekkor $\mathbf{A}^2 = A_0^2 = \text{állandó}$). (Megjegyezzük, hogy a két-elektron rendszernek nincs eredő dipólmomentuma, ezért az elektronok relatív mozgását homogén elektromos térrel nem befolyásolhatjuk (pl. Bergou 1976, Brehme 1971), s ennek alapján már sejthető, hogy az e-e szórás vizsgálata csak dipólközelítésen túl szolgáltathat nem triviális eredményeket.)

Nemrelativisztikus elektronokról lévén szó, eltekinthetünk az elektronok közötti retardált kölcsönhatástól, s ekkor az (5.1a-ban) szereplő V operátor egyszerűen a pillanatszerű Coulomb-kölcsönhatást írja le.

$$V = \frac{e^2}{|\mathbf{r}|}, \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (5.1c)$$

Az intenzív sugárzási terekben lezajló szórásfolyamatok tárgyalásának szokásos útján járva V -t elsőrendű perturbációs számítással vesszük figyelembe, s bázisfüggvényekként a

$$H_0 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (5.2)$$

Schrödinger-egyenlet megoldásait használjuk. Mivel H_0 az egyes elektronok energiaoperátorainak összege, ezért ψ -t szorzat alakban vehetjük fel,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi_1(\mathbf{r}_1, t) \psi_2(\mathbf{r}_2, t), \quad (5.2a)$$

ahol a ψ_1 és ψ_2 egyelektronhullámfüggvények a megfelelő (3.4) egyenletet elégítik ki. ($\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$) antiszimmetrizálásával nem foglalkozunk, mert a vizsgálandó szórásfolyamat főbb vonásait illetően ez lényegtelen.) A harmadik fejezetben láttuk, hogy a (3.4) egyenlet (3.5) megoldásai jól közelíthetők a (3.7) modulációt tartalmazó hullámfüggvényekkel. (5.1b)-t (3.7)-be helyettesítve az integrálás elvégzése után pl. a $\psi_1(\mathbf{r}_1, t)$ perturbálatlan állapot a következőképpen írható

$$\psi_1(\mathbf{r}_1, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 - E_1 t)} \exp \left[i \frac{eA_0}{m\hbar\omega} (\mathbf{p}_1 \mathbf{e}_1 \sin \xi_1 - \mathbf{p}_1 \mathbf{e}_2 \cos \xi_1) \right], \quad (5.3)$$

és teljesen hasonló kifejezés érvényes $\psi_2(\mathbf{r}_2, t)$ -re is. (5.3)-ban az $\omega \rightarrow [\omega - (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}/mc)]$ Doppler-eltolódást és a $v^2 = \left(\frac{eA_0}{mc^2}\right)^2$ -tel arányos intenzitásfüggő energia- és impulzuseltolódást az áttekinthetőség érdekében elhagytuk.

Az e - e szórás átmeneti amplitúdója

$$T_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{1f}^*(\mathbf{r}_1, t) \psi_{2f}^*(\mathbf{r}_2, t) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \psi_{1i}(\mathbf{r}_1, t) \psi_{2i}(\mathbf{r}_2, t), \quad (5.4)$$

ahol ψ -k (5.3) típusú hullámfüggvények. Az $\mathbf{R} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ tömegközépponti és $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ relatív koordinátákat bevezetve, valamint az (1.37) Jacobi—Anger-formulát használva kissé hosszadalmas, de elemi számítás után T_{fi} az alábbi alakra hozható

$$T_{fi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(n)}, \quad (5.4a)$$

ahol

$$T_{fi}^{(n)} \equiv -2\pi i \delta(E_f - E_i + n\hbar\omega) \delta_3(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i + n\hbar\mathbf{k}) t_{fi}^{(n)}, \quad (5.4b)$$

és

$$t_{fi}^{(n)} \equiv \frac{e^{in\varphi}}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r V(\mathbf{r}) J_n \left(z \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \mathbf{r} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \Delta \mathbf{p} \mathbf{r}}, \quad (5.4c)$$

valamint

$$\sin \varphi = -(\Delta \mathbf{p} \mathbf{e}_1) / \Delta p_{\perp}, \quad \Delta \mathbf{p} \equiv \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f, \quad \Delta p_{\perp} \equiv [(\Delta \mathbf{p} \mathbf{e}_1)^2 + (\Delta \mathbf{p} \mathbf{e}_2)^2]^{1/2},$$

$$z \equiv \frac{eA_0}{m\hbar\omega} \Delta p_{\perp}. \quad (5.4d)$$

$\Delta \mathbf{p}$ a $\mathbf{p} \equiv \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$ relatív impulzus változása és J_n n -ed rendű Bessel-függvény. Az (5.4b)-ben látható Dirac-delta azt fejezi ki, hogy az $E \equiv E_1 + E_2$ összenergia és a $\mathbf{P} \equiv \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ összimpulzus $n\hbar\omega$, ill. $n\hbar\mathbf{k}$ értékekkel változhat a szórásfolyamat során. Bebizonyítható, hogy az $n\hbar\omega$ energia tulajdonképpen a kételektron rendszer belső szabadsági fokait (relatív mozgás) gerjeszti. A $t_{fi}^{(n)}$ amplitúdók (5.4c) kifejezését úgy is interpretálhatjuk, hogy a szórást a

$$V_{\text{eff}}^{(n)}(\mathbf{r}) = V(r)J_n\left(z \sin \frac{1}{2} \mathbf{k} \mathbf{r}\right), \quad V(r) = \frac{e^2}{r} \quad (5.5)$$

effektív potenciál írja le. Érdekes, hogy a Bessel-függvények oszcillációja miatt $V_{\text{eff}}^{(n)}$ bizonyos r értékeknél vonzó is lehet. Hogy a szabad elektronok fény jelenlétében vonzhatják egymást már *Oleinik* (1967a—b) és *Farkas és Horváth* (személyes közlés) is sejtették, de tudomásunk szerint a megfelelő potenciálra (5.5) az első analitikus alak, amely ezt az effektív vonzást leírja.

Az (5.4b) átmeneti amplitúdókkal számolva egy n -edrendű folyamat differenciális hatáskeresztmetszetére a következő kifejezést kapjuk

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} \left(\frac{m_r}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V_{\text{eff}}^{(n)}(\mathbf{q})|^2, \quad \mathbf{q} \equiv \frac{\Delta \mathbf{p}}{2\hbar}, \quad (5.6)$$

ahol $m_r = \frac{m}{2}$ a kételektron-rendszer redukált tömege, és $V_{\text{eff}}^{(n)}(\mathbf{q})$ az (5.5) potenciál \mathbf{q} -hoz tartozó Fourier-komponense

$$V_{\text{eff}}^{(n)}(\mathbf{q}) = \int d^3r V_{\text{eff}}^{(n)}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (5.6a)$$

A Bessel-függvények Graaf-féle addíciós formuláját használva (*Erdélyi* 1953) az (5.6a)-beli integrált egyszerűen kiértékelhetjük, s ezután $(d\sigma^{(n)}/d\Omega)$ végső alakjához jutunk.

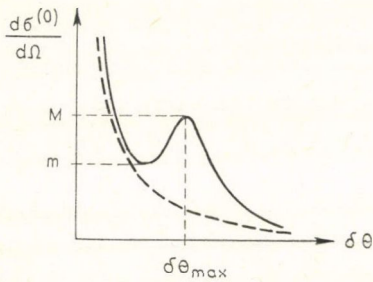
$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = r_0^2 \frac{v_f}{v_i} \left| \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{J_{n+l}\left(\frac{z}{2}\right) J_l\left(\frac{z}{2}\right)}{[(\Delta v/2c) + (n+2l)(\hbar\omega/2mc^2)\mathbf{n}]^2} \right|^2 \quad (5.7)$$

$v_{i,f} \equiv (p_{i,f}/m)$, $\Delta v \equiv (\Delta p/m)$ a relatív sebességváltozás $r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$ a klasszikus elektron sugár, és $\mathbf{n} = (\mathbf{k}/|\mathbf{k}|)$. Hely hiányában (5.7) részletes analízisével itt nem foglalkozunk, csak annyit jegyzünk meg, hogy rugalmas szórás esetében ($n=0$, $|\Delta v| = 2v_i \sin \frac{\delta\Theta}{2}$, $\delta\Theta$ a szórási szög) a szokásos Rutherford-féle rezonancia ($\delta\Theta \sim 0$) mellett ún. belső rezonanciák is megjelennek. Ezt a 4. ábrán szemléltettük.

Végül megemlítjük még, hogy ha $z \ll n$ akkor $(d\sigma^{(n)}/d\Omega)$ jól közelíthető az alábbi formulával.

$$\frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} \approx r_0^2 \frac{v_f}{v_i} \frac{\alpha^n (\Delta v_{\perp}/2c)^{2n}}{(n!)^2 (\Delta v/2c)^4} (\gamma I)^n, \quad (5.7a)$$

ahol $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c}$ a finomszerkezeti állandó, $\gamma \equiv \frac{2\pi c^2}{\hbar\omega^4}$, és I az alkalmazott fény intenzitása.



4. ábra. Az elektron-elektron szórás rugalmas hatáskeresztmetszetének szögfüggése.

$\delta\theta = (\mathbf{p}_{1f} \cdot \mathbf{p}_{1i})$, $\delta\theta_{\max} = (\hbar k/p_{1i}) \cos \theta_0$ és $\theta_0 = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{p}_{1i})$. Megjegyezzük, hogy (m/M) megfelelő intenzitásoknál akár 100 nagyságrendű is lehet

(5.7a) szerint a fejezet elején szóba került n -hatvány törvény az elektron-elektron szórásra is érvényes.

6. Relativisztikus szabad elektron és intenzív fény kölcsönhatásának szemiklasszikus elmélte

Ezt a fejezetet a klasszikus elektromágneses síkhullámmal kölcsönható szabad elektron relativisztikus kvantummechanikai leírására szenteljük.

Először megoldjuk az e. m. síkhullámban levő elektron Dirac-egyenletét és bebizonyítjuk a kapott ún. Volkov-féle megoldásrendszer ortogonalitását. A megfelelő Green-függvények (propagátorok) segítségével elemezzük az említett

Dirac-egyenlethez kapcsolódó peremértékproblémát és bemutatjuk a szabad elektronok nemlineáris szórásfolyamatai konzekvens kvantumelektrodinamikai tárgyalásának ún. Furry-képbeli általános sémáját. Ezután konkrét alkalmazásként kiszámítjuk a kényszerített többfotonos fékezési sugárzás differenciális hatáskeresztmetszetét, ez a 3. fejezet dipólközelítésben kapott nemrelativisztikus eredményeinek általánosítását jelenti.

A síkhullámtérbeli elektron Klein—Gordon-egyenletének megoldásait és propagátorait is tanulmányozzuk, és megvizsgáljuk, hogy hogyan változtatja meg a fénynyel való kölcsönhatás, az elektron impulzustérbeli terjedési tulajdonságait. Végül kiszámítjuk a skalár elektronon történő intenzív Compton-szórás differenciális hatáskeresztmetszetét, amelyet összevetünk az első fejezet ide vonatkozó részével.

6.1. Volkov-állapotok

A szabad elektron Dirac-egyenletének kovariáns alakja az $A(x)$ négyespotenciállal jellemzett elektromágneses térben

$$(\not{\Pi} - \kappa)\psi = 0, \quad \Pi \equiv i\partial - eA, \quad (6.1)$$

$$\kappa \equiv \frac{mc}{\hbar}, \quad e \equiv \frac{e}{\hbar c}. \quad (6.1a)$$

κ az elektron Compton-hullámszáma és $\hbar\Pi$ a kinetikus négyesimpulzus operátora. (6.1)-ben bevezettük a

$$\not{\Pi} \equiv \gamma \cdot \Pi \equiv g_{\mu\nu} \gamma^\mu \Pi^\nu \quad (6.1b)$$

jelölést, ahol γ^μ -k a Dirac-féle mátrixok, amelyek az alábbi felcserélési törvénynek tesznek eleget

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3). \quad (6.1c)$$

A továbbiakban a $\gamma \cdot a$ típusú szorzatokat a -nak írjuk a többi kovariáns jelölést az első fejezet (11.1b, e, g—h, i) egyenleteiben már bevezettük.

Síkhullámokat leíró potenciálok esetében — amint azt *Volkov* (1935) már régen megmutatta — a (6.1) Dirac-egyenlet egzaktul megoldható. A Volkov-féle állapotok alapvető fontosságúak a szabad elektronok többfotonos szórásfolyamatainak elméletében, ezért először *Volkov* (1935), és *Brown* és *Kibble* (1964) nyomán végig követjük a (6.1) egyenlet megoldásának főbb lépéseit az

$$A = (0, \mathbf{A}(\xi)), \quad \xi \equiv k \cdot x, \quad k \cdot A = k^2 = 0 \quad (6.1d)$$

síkhullám potenciálokra.

Ha ψ kielégíti a

$$(\not{\Pi} - \kappa)(\not{\Pi} + \kappa)\psi = 0 \quad (6.2)$$

másodrendű Dirac-egyenletet, akkor $\psi = (\not{\Pi} + \kappa)\psi$ nyilván (6.1)-nek megoldása. (6.1c)-t és $A(\xi)$ transzverzalizását kihasználva (6.2)-t az alábbi alakra hozhatjuk

$$(\Pi^2 - \kappa^2 - \frac{1}{2}\varepsilon\sigma F)\psi = 0, \quad (6.2a)$$

ahol

$$\frac{1}{2}\varepsilon\sigma F \equiv \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = i\varepsilon k \frac{dA}{d\xi}, \quad (6.2b)$$

és

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu], \quad F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (6.2c)$$

Az $\frac{1}{2}\varepsilon\sigma F$ tag a spin-dipól és az F térerősségtenzorú elektromágneses sugárzás kölcsönhatásáról ad számot. (6.2a) pozitív és negatív frekvenciás megoldásait ξ szerint modulált síkhullám alakban keressük,

$$\psi = \psi_{ps}^{(\pm)} = \exp[\mp i(p \cdot x + g^{(\pm)}(\xi))] u_{ps}^{(\pm)}, \quad (6.3)$$

$q^{(\pm)}(\xi)$ meghatározandó mátrix-függvények amelyekről feltesszük, hogy deriváltjukkal felcserélhetők (a megoldás igazolni fogja ezt a feltevést), $u_{ps}^{(\pm)}$ pozitív és negatív frekvenciás szabad bispinorokat jelöl

$$(p \mp \kappa) u_{ps}^{(\pm)} = 0. \quad (6.3a)$$

$\hbar p = \hbar(+\sqrt{\mathbf{p}^2 + \kappa^2}, \mathbf{p})$ a $p^2 = \kappa^2$ egyenlőség által definiált szabad tömeghéjon levő négyesimpulzus, $s=1,2$ a spinindex. (6.3)-at (6.2a)-ba helyettesítve $g^{(\pm)}(\xi)$ -re a

$$\frac{dg^{(\pm)}(\xi)}{d\xi} = I_p^{(\pm)}(\xi) \pm \frac{1}{2}\varepsilon\sigma F(\xi) \quad (6.4a)$$

közönséges differenciálegyenlet adódik, amelynek megoldása (6.2b) figyelembevételével a következőképpen írható

$$g^{(\pm)}(\xi) = \int_{\xi_0}^{\xi} I_p^{(\pm)}(\xi') d\xi' \pm i \frac{\varepsilon k A(\xi)}{2k \cdot p}, \quad (6.4b)$$

ahol

$$I_p^{(\pm)}(\xi) = \frac{1}{2k \cdot p} [\pm 2\epsilon p \cdot A(\xi) - \epsilon^2 A^2(\xi)]. \quad (6.4c)$$

Mivel $(k \cdot A)^2 = 0$ ezért $\exp\left(\pm \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}\right) = 1 \pm \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}$, és így (6.4b) és (6.3) alapján $\psi_{ps}^{(\pm)}$ -re az alábbi kifejezést kapjuk

$$\psi_{ps}^{(\pm)} = \left(1 \pm \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}\right) u_{ps}^{(\pm)} \exp\left[\mp i \left(p \cdot x + \int^\xi I_p^{(\pm)}(\xi') d\xi'\right)\right] \quad (6.5)$$

Belátható, hogy $(\not{p} + \not{\kappa})\psi_{ps}^{(\pm)} = 2\kappa\psi_{ps}^{(\pm)}$, tehát (6.5) (6.1)-nek is megoldása,

$$\begin{aligned} \psi = \psi_{ps}^{(\pm)}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{\kappa}{p_0}\right)^{1/2} \left(1 \pm \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}\right) u_{ps}^{(\pm)} \times \\ &\times \exp\left[\mp i \left(p \cdot x + \int^\xi I_p^{(\pm)}(\xi') d\xi'\right)\right]. \end{aligned} \quad (6.6)$$

(Később látni fogjuk, hogy a (6.6)-ban bevezetett normálási faktor Dirac-deltás ortogonalitásnak felel meg.) A (6.6) állapotokat Volkov után több szerző is megkapta különböző módszerek segítségével (Alperin 1944, Beers és Nickle 1972, Mitter 1975). Megjegyezzük még, hogy a Dirac-mátrixok Majorana-ábrázolását használva a Volkov-állapotok a másodrendű Dirac-egyenlet közbeiktatása nélkül is származtathatók (Bergou és Varró 1980a).

A hatvanas évek első felétől kezdődően a Volkov-állapotokat sokan alkalmazták a szabad elektronok többfotonos szórásfolyamatai szemiklasszikus leírásához (pl. Goldman 1964, Brown és Kibble 1964, Nyikisov és Ritusz 1964, Gyeńiszov és Fjodorov 1967, Bős és munkatársai 1979a, b) oly módon, hogy e megoldásrendszert használták bázisul különböző perturbációs számításokban, anélkül, hogy az ortogonalitást vagy teljességet bebizonyították volna. A (6.6) hullámfüggvények

$$\int \bar{\psi}_{ps}^{(\pm)}(x) \gamma_0 \psi_{p's'}^{(\pm)}(x) d^3r = \delta_3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'}, \quad (6.7a)$$

$$\int \bar{\psi}_{ps}^{(\pm)}(x) \gamma_0 \psi_{p's'}^{(\mp)}(x) d^3r = 0, \quad (\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma_0) \quad (6.7b)$$

ortogonalitásainak bizonyítását elsőként Ritusz (1979) közölte, azonban számításai során az $u_{ps}^{(\pm)}$ bispinorok konkrét reprezentációját erősen kihasználta. A következőkben mi egy reprezentációfüggetlen bizonyítást adunk.

Tekintsük pl. az

$$\begin{aligned} \int \bar{\psi}_{ps}^{(+)} \gamma_0 \psi_{p's'}^{(+)} d^3r &= \int d^3r \bar{u}_{ps}^{(+)} \left(1 - \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}\right) \gamma_0 \left(1 + \frac{\epsilon k A}{2k \cdot p}\right) u_{p's'}^{(+)} \times \\ &\times e^{i\{(p-p') \cdot x + \int [I_p^{(+)}(\xi) - I_{p'}^{(+)}(\xi)] d\xi\}} \end{aligned} \quad (6.8)$$

ortogonalitási integrált. $(\bar{\psi}_{ps}^{(\pm)})$ kiszámításánál figyelembe vettük, hogy $\gamma_0 \gamma_\mu^+ \gamma_0 = = \gamma_{\mu\cdot}$ $\psi_{ps}^{(\pm)}$ (6.1)-be való behelyettesítésével meggyőződhetünk az alábbi képletek

helyességéről (a könnyebb áttekinthetőség érdekében a (+) felső indexet nem tüntetjük fel).

$$(\Pi_p + kI_p)\Psi_{ps} = \varkappa\Psi_{ps}, \quad \bar{\Psi}_{ps}(\Pi_p + kI_p) = \bar{\Psi}_{ps}\varkappa, \quad (\Pi_p \equiv p - \varepsilon A). \quad (6.9a)$$

(6.9a)-t használva belátható, hogy tetszőleges $\{a^\mu\}$ négyesvektor esetében érvényes a

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{ps} a \Psi_{p's'} &= \frac{1}{2\varkappa} \bar{\Psi}_{ps} [(\Pi_p + kI_p + \Pi_{p'} + kI_{p'}) \cdot a - \\ &\quad - i\sigma_{\mu\nu}(\Pi_p + kI_p - \Pi_{p'} - kI_{p'})^\mu a^\nu] \Psi_{p's'} \end{aligned} \quad (6.9b)$$

Gordon-féle felbontás (Bjorken és Drell 1964), ha $a^\nu = \delta_{\nu,0}$, akkor

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{ps} \gamma_0 \Psi_{p's'} &= \frac{1}{2\varkappa} \bar{\Psi}_{ps} \{p_0 + p'_0 + k_0(I_p + I_{p'}) - \\ &\quad - i\sigma_{j0}[\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{k}(I_p - I_{p'})]\} \Psi_{p's'} \end{aligned} \quad (6.9c)$$

Mivel (6.8)-ban A és $I_{p,p'}$ csak $\mathbf{r k}$ irányú komponensétől függ, ezért $\mathbf{r k}$ -ra merőleges komponenseire a kijelölt integrálás azonnal elvégezhető. Ha pl. $\mathbf{k} = (0, 0, k_z = k_0)$, akkor a (6.9c) és (6.5) képleteket is figyelembe véve (6.8) a következő alakra hozható

$$\begin{aligned} \int \bar{\Psi}_{ps} \gamma_0 \Psi_{p's'} d^3r &= \frac{(2\pi)^2}{2\varkappa} \delta(p_x - p'_x) \delta(p_y - p'_y) e^{i(p_0 - p'_0)x_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i(p'_z - p_z)\zeta} \left(\frac{d\zeta}{dz}\right)^{-1} \times \\ &\quad \times \bar{u}_{ps} \left(1 - \frac{\varepsilon k A}{2k \cdot p}\right) \left\{p_0 + p'_0 + k_0 \frac{k \cdot (p + p')}{2k \cdot p k \cdot p'} (2\varepsilon p \cdot A - \varepsilon^2 A^2) - \right. \\ &\quad \left. - i\sigma_{30} \left[p_z - p'_z + k_0 \frac{k \cdot (p' - p)}{2k \cdot p k \cdot p'} (2\varepsilon p \cdot A - \varepsilon^2 A^2)\right]\right\} \left(1 + \frac{\varepsilon k A}{2k \cdot p'}\right) u_{p's'}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

(6.10)-ben bevezettük a

$$\zeta \equiv z + \frac{k \cdot (p' - p)}{2k \cdot p k \cdot p} \frac{1}{p'_z - p_z} \int_{-\infty}^{\zeta} d\zeta' (2\varepsilon p \cdot A - \varepsilon^2 A^2) \quad (6.10a)$$

új integrációs változót. A (6.10a) definíciós egyenletből könnyen belátható, hogy

$$\frac{k_0}{2k \cdot p k \cdot p'} (2\varepsilon p \cdot A - \varepsilon^2 A^2) = \frac{p'_z - p_z}{k \cdot (p' - p)} \left(1 - \frac{d\zeta}{dz}\right). \quad (6.10b)$$

Ha (6.10) {} zárójelében (6.10b)-t a megfelelő helyeken felhasználjuk, valamint figyelembe vesszük a Dirac-delták által kifejezett $p_x = p'_x, p_y = p'_y$ egyenlőségeket, s azt, hogy mind p mind p' a szabad tömeghéjon van, akkor (6.10)-et lényegesen egy-

szerűbb szerkezetűvé tehetjük,

$$\begin{aligned} \int \bar{\Psi}_{ps} \gamma_0 \Psi_{p's'} d^3r &= \frac{(2\pi)^2}{2\kappa} \delta(p_x - p'_x) \delta(p_y - p'_y) e^{i(p_0 - p'_0)x_0} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i(p'_z - p_z)\zeta} \bar{u}_{ps} \left[\frac{p_z - p'_z}{k \cdot (p' - p)} k \cdot (p + p') - (p_z - p'_z) i\sigma_{30} - \right. \\ &\left. - (p_z - p'_z) \frac{k \cdot (p + p')}{2k \cdot pk \cdot p'} (1 + i\sigma_{30}) \varepsilon k A \right] u_{p's'}. \end{aligned} \quad (6.10c)$$

Mivel a tekintett $\{k^\mu\} = (k_0, 0, 0, k_0)$ esetben $1 + i\sigma_{30} = (\gamma_0/k_0)k$, ezért (6.10c) [] zárójelében a harmadik tag $k^2 = k^2 = 0$ miatt zérus. A ζ szerinti integrálás elvégzése után a

$$\begin{aligned} \delta(p'_z - p_z) \frac{p_z - p'_z}{k \cdot (p' - p)} k \cdot (p + p') &= \delta(p'_z - p_z) \lim_{p_z \rightarrow p_z} \frac{p_z - p'_z}{k \cdot (p' - p)} k \cdot (p + p') = \\ &= 2p_0 \delta(p_z - p'_z) \end{aligned}$$

összefüggés alapján a (6.8)-ban kijelölt ortogonalitási integrálra (6.10c) szerint végül a következő formulát nyerjük

$$\int \bar{\Psi}_{ps}(x) \gamma_0 \Psi_{p's'}(x) d^3r = (2\pi)^3 (p_0/\kappa) \delta_3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \quad (6.11)$$

A Volkov állapotokat tehát ugyanúgy kell normálnunk mint a szabad síkhullámokat (amint ezt (6.6)-ban feltüntettük). Hasonlóan bizonyítható a (6.7a—b)-ben szereplő többi összefüggés is.

A Volkov-állapotok $t=t'$ hipersíkon vett

$$\sum_{s=1,2} \int d^3p [\psi_{ps}^{(+)}(x) \bar{\psi}_{ps}^{(+)}(x') \gamma_0 + \psi_{ps}^{(-)}(x) \bar{\psi}_{ps}^{(-)}(x') \gamma_0]_{t=t'} = \delta_3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6.12)$$

teljességét sajnos ez ideig nem sikerült expliciten igazolni. Megjegyezzük, hogy az ún. fényszerű formalizmus (Neville és Rohrlich 1971a, b, Mitter 1975) segítségével megmutatható, hogy a $k \cdot x \equiv \xi \equiv$ konstans hipersíkon (6.7a—b)-vel analóg ortogonalitási relációk érvényesek, sőt ezen a hipersíkon a Volkov-állapotok teljes rendszert képeznek (Bergou és Varró 1980a), azonban az erre vonatkozó részleteket itt nem közöljük, egyrészt helykímélés céljából, másrészt azért, mert ezeket az eredményeket a későbbiekben nem fogjuk felhasználni.

Ha a (6.2a) másodrendű Dirac-egyenletben a spin-elektromágneses tér kölcsönhatást leíró $(1/2)\varepsilon\sigma F$ tagtól eltekintünk, akkor a Klein—Gordon egyenlethez jutunk, amelynek $\Phi_p^{(\pm)}$ megoldásai (6.5)-ből a bispinor amplitúdók elhagyásával kaphatók,

$$\Phi_p^{(\pm)} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} (2p_0)^{1/2}} \exp \left\{ \mp i \left[p \cdot x + \int I_p^{(\pm)}(\xi') d\xi' \right] \right\}. \quad (6.13)$$

Érdekes, hogy $\Phi_p^{(\pm)} \sim \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S(x, P) \right]$ alakú, ahol S az első fejezetben látott (1.21) klasszikus hatásfüggvény ($P \equiv \hbar p$), tehát ez esetben a WKB-közelítés teljesen pontos. A $\Phi_p^{(\pm)}$ megoldások ortogonális rendszert képeznek a következő értelemben

(Eberly 1969)

$$\int \Phi_p^{(\pm)*}(x) i \overleftrightarrow{\partial}_0 \Phi_{p'}^{(\pm)}(x) d^3x = \delta_3(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (6.14a)$$

$$\int \Phi_p^{(\pm)*}(x) i \overleftrightarrow{\partial}_0 \Phi_{p'}^{(\mp)}(x) d^3x = 0, \quad (6.14b)$$

ahol

$$f \overleftrightarrow{\partial}_0 g \equiv f(\partial g / \partial x_0) - (\partial f / \partial x_0)g.$$

Megjegyezzük, hogy (6.13)-ból nemrelativisztikus határesetben a (3.7) faktort tartalmazó (3.5) megoldást kapjuk.

6.2. Az elektron relativisztikus hullámegyenleteinek peremértékproblémája elektromágneses síkhullámtérben.

Green-függvények

A (6.1) egyenlet peremértékproblémájának megfogalmazása a következő (Jauch és Rohrlich 1955): (6.1) $\psi(x)$ megoldása legyen adott egy térszerű hipersíkon (pl. a $t=t_1$ időpontban a hármas térben). Határozzuk meg $\psi(x)$ -et a teljes téridőben ($\forall t \gtrless t_1$ időpontban a hármastérben). A feladat (6.1) Green-függvényeivel (propagátoraival) oldható meg.

A (6.1) egyenlet $G(x, y; A)$ Green-függvényei definíció szerint az alábbi inhomogén egyenletet elégítik ki

$$(\square_x - \kappa)G(x, y; A) = \delta_4(x - y). \quad (6.15)$$

Hasonlóan a hullámfüggvényekhez, ha $g(x, y; A)$ kielégíti a

$$\left(\Pi_x^2 - \kappa^2 - \frac{1}{2} \varepsilon \sigma F(x) \right) g(x, y; A) = \delta_4(x - y) \quad (6.15a)$$

másodrendű egyenletet, akkor $(\square_x + \kappa)g(x, y; A)$ megoldása (6.15)-nek. (6.15) megoldását először Brown és Kibble (1964) közölték a következő formában:

$$G(x, y; A) = (\square_x + \kappa) \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{\exp \left\{ -i \left[p \cdot (x - y) + \int_{\eta}^{\xi} J_p(\xi') d\xi' \right] \right\}}{p^2 - \kappa^2} \quad (6.15b)$$

ahol

$$\xi \equiv k \cdot x, \quad \eta \equiv k \cdot y, \quad J_p(\xi) \equiv I_p(\xi) - \frac{\varepsilon}{4p \cdot k} \sigma F(\xi) \quad (6.15c)$$

A $(\square_x + \kappa)$ -val való beszorzás elvégzése után egy explicitebb alakot kaphatunk

$$G(x, y; A) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \left(1 + \frac{\varepsilon k A(\xi)}{2k \cdot p} \right) \frac{p + \kappa}{p^2 - \kappa^2} \left(1 - \frac{k A(\eta)}{2k \cdot p} \right) \times \\ \times \exp \left\{ -i \left[p \cdot (x - y) + \int_{\eta}^{\xi} I_p(\xi') d\xi' \right] \right\} \quad (6.15d)$$

(erre az alakra vonatkozólag lásd pl. *Beers és Nickle 1972, Mitter 1975, Ritusz 1972*). Könnyen igazolható, hogy ha (6.13d)-ben a p_0 szerinti integrálást a Feynmann-féle peremfeltételnek (pl. *Bjorken és Drell 1964*) megfelelő kontúron végezzük, akkor az így kapott propagátor kifejezhető a (6.6) állapotok diadikus integráljaival,

$$G_F(x, y; A) = G^{(+)}(x, y; A) + G^{(-)}(x, y; A), \quad (6.16a)$$

ahol

$$G^{(\pm)}(x, y; A) \equiv \mp i \sum_{s=1,2} \int d^3p \psi_{ps}^{(\pm)}(x) \bar{\psi}_p^{(\pm)}(y) \Theta(\pm x_0 \mp y_0), \quad (6.16b)$$

és Θ az egység ugrás függvény,

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t < 0. \end{cases} \quad (6.16c)$$

A (6.7a—b) ortogonalításokat felhasználva egyszerűen belátható, hogy a (6.16a) propagátor (6.1) pozitív, ill. negatív energiás megoldásait időben előre, ill. visszafelé terjeszti,

$$\psi^{(\pm)}(x) \Theta(\pm x_0 \mp y_0) = \pm i \int d^3y G_F(x, y; A) \gamma_0 \psi^{(\pm)}(y). \quad (6.17)$$

(6.17) a Feynman-féle peremértékprobléma megoldását jelenti.

Ha (6.15a)-ban az $(1/2)\varepsilon\sigma F$ tagot elhanyagoljuk, akkor az inhomogén Klein—Gordon-egyenlethez jutunk, amelynek $\mathcal{G}(x, y; A)$ megoldása (6.15d)-ből a megfelelő mátrixamplitúdók elhagyásával kapható,

$$\mathcal{G}(x, y; A) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{\exp\left\{-i\left[p \cdot (x-y) + \int_{\eta}^{\xi} I_p(\xi') d\xi'\right]\right\}}{p^2 - \kappa^2}. \quad (6.18)$$

Könnyen belátható, hogy a Feynman-féle peremfeltételhez tartozó \mathcal{G}_F propagátor (G_F (6.16a) alakjával teljesen analóg módon) a (6.13)-beli hullámfüggvények diad-integráljaként állítható elő,

$$\mathcal{G}_F(x, y; A) = \mathcal{G}^{(+)}(x, y; A) + \mathcal{G}^{(-)}(x, y; A), \quad (6.19a)$$

ahol

$$\mathcal{G}^{(\pm)}(x, y; A) \equiv -i \int d^3p \Phi_p^{(\pm)}(x) \Phi_p^{(\pm)*}(y) \Theta(\pm x_0 \mp y_0). \quad (6.19b)$$

(6.19a—b) és (6.14a—b) alapján be lehet bizonyítani, hogy \mathcal{G}_F a pozitív, ill. negatív energiás állapotokat időben előre, ill. visszafelé terjeszti,

$$\Phi^{(\pm)}(x) \Theta(\pm x_0 \mp y_0) = i \int d^3y \mathcal{G}_F(x, y; A) \overleftrightarrow{i\partial}_{y_0} \Phi^{(\pm)}(y). \quad (6.20)$$

A fenti formális részletek befejezésekképpen megvizsgáljuk, hogy a fénnel való kölcsönhatás hogyan módosítja a szabad elektronok impulzustérbeli terjedését. Az egyszerűség kedvéért a skalár elektronok (6.18) propagátorát tanulmányozzuk az

$$A = a_0(\epsilon e^{-ik \cdot x} + \epsilon^* e^{ik \cdot x}), \quad (6.21)$$

$$(k^2 = \epsilon^2 = \epsilon^{*2} = k \cdot \epsilon = 0, \quad \epsilon^* \cdot \epsilon = -1) \quad (6.21a)$$

vektorpotenciál esetében (ekkor $A^2 = -2a_0^2 = \text{állandó}$). Az impulzustérbe az alábbi kettős Fourier-transzformációval térhetünk át;

$$\mathcal{G}(p, q; A) = \int d^4x d^4y \mathcal{G}(x, y; A) e^{i(p \cdot x - q \cdot y)} \quad (6.22)$$

Az (1.37) Jacobi—Anger-formula segítségével $\mathcal{G}(p, q; A)$ -ra a következő kifejezés adódik (Eberly 1968):

$$\mathcal{G}(p, q; A) = (2\pi)^4 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta_4(p + lk - q) e^{il\varphi} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \frac{J_{l+r}(\zeta) J_r(\zeta)}{(q - rk)^2 - \kappa_*^2}, \quad (6.23)$$

ahol

$$\zeta \equiv 2 \frac{\varepsilon a_0}{k \cdot p} |p \cdot \epsilon|, \quad \varphi \equiv \arg(p \cdot \epsilon^*), \quad (6.23a)$$

és

$$\kappa_*^2 \equiv \kappa^2 + 2\varepsilon^2 a_0^2 \quad (6.23b)$$

($J-k$ egészrendű Bessel-függvények). (6.23) szerint az impulzustérbeli Green-függvénynek végtelen sok nemdiagonális összetevője és pólusa van, amely fotonok abszorpciójának és emissziójának felel meg. A szabad tömeghőj reláció helyébe a

$$(p - rk)^2 = \kappa_*^2, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6.23c)$$

összefüggés lép, ez azt jelenti, hogy az elektronnak egy meghatározott intenzitás-függő ($\hbar \kappa^*/c$) tömege van, azonban a négyesimpulzusa a (6.23c) nívószerkezetet mutatja. Ez az optikailag indukált szintszerkezet.

6.3. Szórásszámítás. Furry-kép

A (6.16) Green-függvény segítségével elegánsan leírhatjuk a szabad elektron intenzív fényben lejátszódó szórásfolyamatait. Tekintsünk egy $V(x)$ potenciálon való szóródást. Az elektron $\psi(x)$ állapota most a

$$(\square - \kappa)\psi(x) = \varepsilon V(x)\psi(x) \quad (6.24)$$

Dirac-egyenletet elégíti ki, amely (6.15)-öt figyelembe véve átírható a következő integrálegyenletre

$$\psi(x) = \psi_i(x) + \varepsilon \int d^4y G_F(x, y; A) V(y) \psi(y), \quad (6.25)$$

ahol a ψ_i kezdeti állapot a (6.1) egyenlet megoldása. (6.25)-öt szukcesszív approximációval oldhatjuk meg, eszerint

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi_i(x) + \varepsilon \int d^4y G_F(x, y; A) V(y) \psi_i(y) + \\ &+ \varepsilon^2 \int d^4y d^4z G_F(x, y; A) V(y) G_F(y, z; A) \psi_i(z) + \dots \end{aligned} \quad (6.26)$$

Pl. egy $\psi_i^{(+)} \rightarrow \psi_f^{(+)}$ folyamat szórásmátrixa $S_{fi} = \lim_{x_0 \rightarrow \infty} \int d^3x \bar{\psi}_f^{(+)} \gamma_0 \psi_i$. A (6.26), (6.16a—b) és (6.7a—b) összefüggéseket használva egyszerűen belátható, hogy pl. a pozitív frekvenciás Volkov-állapotok között a $V(x)$ potenciál hatására bekövetkező

nemtriviális átmenetek $T_{fi} \equiv (S-1)_{fi}$ valószínűségi amplitúdója az alábbi alakra hozható

$$T_{fi} = -i\varepsilon \int d^4x \bar{\psi}_{p_f s_f}^{(+)}(x) V(x) \psi_{p_i s_i}^{(+)}(x) + \\ + (-i\varepsilon^2) \int d^4x d^4y \bar{\psi}_{p_f s_f}^{(+)}(x) V(x) G_F(x, y; A) V(y) \psi_{p_i s_i}^{(+)}(y) + \dots \quad (6.27)$$

T_{fi} kiszámítására az imént bemutatott eljárás tulajdonképpen egy speciális — a Volkov állapotokkal felépített — Furry-képbeli perturbációszámítás. T_{fi} V -ben különböző rendű járulékait gráfokkal szemléltethetjük, teljesen hasonlóan a szokásos Feynman-gráfokhoz: (6.27a)-ban az időtengely irányába mutató kettős nyilak Volkov állapotban levő elektront reprezentálnak, a vonalak töréshelyei a potenciállal való kölcsönhatásnak felelnek meg, s a kölcsönhatási pontok közötti belső vonalakat irányítástól függően a $G^{(+)}$ vagy $G^{(-)}$ propagátorokhoz rendeljük.

$$T_{fi} = \text{diagram 1} + \left(\text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right)$$

—————> időtengely

A lézerefényben végbemenő szórási folyamatok konzekvens kvantumelektrodinamikai tárgyalását tehát Furry-képben célszerű elvégezni, úgy, hogy az elektromágneses tér vektorpotenciáljának a lézerefényt leíró klasszikus részét az elektronok ψ téroperátorában eleve egzaktul figyelembe vesszük. A következőkben röviden áttekintjük ennek az eljárásnak a formális vonatkozásait.

Az elektrontér és az elektromágneses tér kölcsönhatási Hamilton-operátora

$$H_{int} = \frac{1}{c} \int j(x) \cdot [A(x) + a(x)] d^3x, \quad (6.28)$$

amelyben $A(x)$ a lézerefény potenciálja. A Furry-képbe az

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \frac{1}{c} \int j(x) \cdot A(x) d^3x K \quad (6.29)$$

egyenletet kielégítő K kanonikus transzformációval térhetünk át (*Jauch és Rohrlich* 1955). Ebben a képben az állapotok az alábbi Schrödinger-egyenletnek tesznek eleget

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\rangle = \frac{1}{c} \int j_F(x) \cdot a(x) d^3x |\rangle, \quad (6.30a)$$

ahol

$$j_F(x) \equiv K^{-1} j(x) K = ce \bar{\psi}_F(x) \gamma \psi_F(x). \quad (6.30b)$$

$\psi_F(x)$ a szabad $\psi(x)$ téroperátorból a

$$\psi_F(x) = K^{-1} \psi(x) K \quad (6.30c)$$

transzformációval származtatható és kielégíti a (6.1) Dirac-egyenletet,

$$(\square_x - \kappa) \psi_F(x) = 0. \quad (6.30d)$$

$\psi_F(x)$ a (6.6) Volkov-állapotok szuperpozíciója,

$$\psi_F(x) = \sum_{s=1,2} \int d^3p [a_s(\mathbf{p}) \psi_{ps}^{(+)}(x) + b_s^{+}(\mathbf{p}) \psi_{ps}^{(-)}(x)] = \psi_F^{(+)}(x) + \psi_F^{(-)}(x), \quad (6.31)$$

ahol $a_s(\mathbf{p})-k$, ill. $b_s^{+}(\mathbf{p})-k$ a szokásos elektronabszorpció és pozitronemissziós fermionoperátorok. $a_s(\mathbf{p})-k$ pl. a következő antikommutációs törvénynek engedelmeskednek

$$\{a_s(\mathbf{p}), a_s^{+}(\mathbf{p}')\} = \delta_3(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \delta_{ss}, \quad \{a_s(\mathbf{p}), a_s(\mathbf{p}')\} = 0. \quad (6.31a)$$

(6.31) és (6.31a) felhasználásával az elektronok $G^{(+)}$ Green-függvénye a ψ_F téroperátorral a következőképpen fejezhető ki

$$\Theta(x_0 - y_0) \{\psi_F^{(+)}(x), \bar{\psi}_F^{(+)}(y)\} = iG^{(+)}(x, y; A). \quad (6.31b)$$

A rendszer S -operátora (6.30a) alapján

$$S = P \exp \left\{ -ie \int d^4x [\bar{\psi}_F(x) \gamma \psi_F(x)] \cdot a(x) \right\}, \quad (6.32)$$

ahol P a Dyson-féle szimbólum. (6.32) kifejtésével közvetlenül belátható, hogy a $T_{fi} = \langle f | (S-1) | i \rangle$ átmeneti amplitúdók megegyeznek (6.27)-tel, ha $|f\rangle$ és $|i\rangle$ egyelektron állapotok és $a(x) = V(x)$ nem kvantált vektorpotenciál.

Az itt bemutatott Furry-kép alkalmas szabad elektronok intenzív lézerfényben lezajló spontán sugárzásos folyamatainak leírására, sugárzási korrekciók kiszámítására is. Jelen dolgozatban csak a Furry-képbeli elsőrendű folyamatokkal foglalkozunk, ezért az imént vázolt teljes kvantumelektrodinamikai apparátusra valójában nincs szükségünk.

(6.27) alkalmazásaként vizsgáljuk meg (Bergou és Varró 1980a) egy $V_0(\mathbf{r})$ skalárpotenciállal jellemzett ion hatására a szabad elektron lézerfényben lejátszódó többfotonos kényszerített fékezésését (ezt a folyamatot nemrelativisztikus elektronokra a 3. és 4. fejezetben már részletesen tárgyaltuk). A (6.6) Volkov-állapotok közötti átmenet $V_0(\mathbf{r})$ -ben elsőrendű valószínűségi amplitúdója

$$T_{fi} = -ie \int d^4x \bar{\psi}_{p's'}^{(+)}(x) \gamma_0 V_0(\mathbf{r}) \psi_{ps}^{(+)}(x) \quad (= \text{diagram}) \quad (6.33)$$

(6.33)-at az egyszerűség kedvéért a (6.21) cirkulárisan polarizált vektorpotenciál esetében értékeljük ki.

Az (1.37) Jacobi—Anger-formula segítségével T_{fi} parciális amplitúdók inkoherens szuperpozíciójaként állítható elő,

$$T_{fi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(n)}, \quad T_{fi}^{(n)} \equiv -2\pi i \delta(p'_0 - p_0 + (\zeta - n)k_0) t_{fi}^{(n)}, \quad (6.34a)$$

ahol

$$\zeta \equiv \frac{\varepsilon^2 A_0^2}{2} \left(\frac{1}{p' \cdot k} - \frac{1}{p \cdot k} \right), \quad t_{fi}^{(n)} = \frac{\varepsilon \kappa}{(2\pi)^3 (p'_0 p_0)^{1/2}} V_0(\mathbf{Q}_n) \bar{u}_{p's'}^{(+)} M_n u_{ps}^{(+)}, \quad (6.34b)$$

és

$$\mathbf{Q}_n \equiv \mathbf{p} - \mathbf{p}' + (n - \zeta) \mathbf{k}, \quad (6.34c)$$

$$M_n \equiv \left(\gamma_0 + \frac{\varepsilon^2 A_0^2 k_0}{k \cdot p k \cdot p'} \right) B_n + \frac{\varepsilon A_0}{2} \left(\frac{\gamma_0 k}{k \cdot p} + \frac{k \gamma_0}{k \cdot p'} \right) \left(\not{\epsilon} B_{n-1} + \not{\epsilon}^* B_{n+1} \right), \quad (6.34d)$$

valamint $\epsilon \equiv \gamma \cdot \epsilon$, $\epsilon^* \equiv \gamma \cdot \epsilon^*$,

$$B_n \equiv J_n(|z|) e^{-inx}, \quad z \equiv 2\epsilon A_0 \left(\frac{\epsilon \cdot p'}{k \cdot p'} - \frac{\epsilon \cdot p}{k \cdot p} \right) = |z| e^{-ix} \quad (6.34e)$$

$V_0(Q_n)$ a szórópotenciál Q_n átadott impulzushoz tartozó Fourier-komponense, J_n n -edrendű Bessel-függvény.

A (6.34a)-ban szereplő Dirac-delták az n -fotonos abszorpciókhoz ($n > 0$), ill. emissziókhoz ($n < 0$) tartozó energiamegmaradást fejezik ki. $T_{fi}^{(n)}$ -ből egy n -edrendű folyamat differenciális hatáskeresztmetszete a szokásos módon számítható, mi itt csak a végeredményt adjuk meg (polarizálatlan elektronok esetében):

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{(n)}}{d\Omega} = & \frac{|\mathbf{p}'|}{|\mathbf{p}|} J_n^2(|z|) \frac{d\sigma_B^{(n)}}{d\Omega} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{p_0 p'_0 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'}{\kappa^2} \right) \left(\frac{p'_0}{\kappa} \right) + \\ & + \frac{|\mathbf{p}'|}{|\mathbf{p}|} \frac{d\sigma_B^{(n)}}{d\Omega} \left(\frac{p'_0}{\kappa} \right) (\alpha_n v + \beta_n v^2 + \gamma_n v^3 + \delta_n v^4) \end{aligned} \quad (6.35)$$

Az α_n , β_n , γ_n és δ_n együtthatók a $v = \frac{ea_0}{mc^2}$ intenzitás paramétertől a J_n és J_{n+1} Bessel-függvényeken keresztül függenek, tehát korlátosak, pontos alakjukat bonyolultságuk miatt itt nem közöljük. (6.35) jobb oldalának első tagja a (3.22) nemrelativisztikus kifejezés közvetlen általánosítása relativisztikus elektronokra dipólközelítésen túl. A második tag a spin-lézerfény kölcsönhatásból ered, s az elsőhöz képest elég széles intenzitástartományban ($n\hbar\omega/2mc^2$) rendű korrekciót jelent, amely optikai frekvenciáknál csak $n \sim 10^5$ rendű folyamatoknál számottevő. Ha ezt a tagot elhagyjuk, akkor (6.35) átmegy a *Schlessinger* és *Wright* (1979, 1980) által skalár elektronokra kapott hatáskeresztmetszetbe.

6.4. Intenzív Compton-szórás skalár elektronon

Az intenzív Compton-szórásról először *Alperin* (1944) tanulmányozta a (6.1) Dirac-egyenlet általa kapott (a Volkov-állapotokkal unitér-ekvivalens) egzakt megoldásai segítségével, az átmeneti áramok módszerét használva. Munkája azonban abban az időben nem talált visszhangra. A lézerek megjelenése után az intenzív tér elektrodinamika erőteljes fejlődésnek indult, s szinte egyidőben számos dolgozat jelent meg az intenzív Compton-szórásról (*Goldman* 1964, *Brown és Kibble* 1964, *Nyikisov és Ritusz* 1964, *Narozsnyij, Nyikisov és Ritusz* 1964, *Frantz* 1965, *Kibble* 1965), amelyekben a szerzők a Volkov-állapotokra alapozva publikáltak szemiklasszikus számításokat. (*Fried* (1963) a másodharmonikus keltés leírásához a Bloch—Norsieck-modellt használta.) Mindezek mellett úgy érezzük, hogy szükség van a skalár elektronon történő intenzív fényszórás analízisére is, mivel ez az előbb említett munkák egyikében sem található meg. Az elektron Klein—Gordon-egyenlettel való leírása formuláink spintől eredő bonyolultságának kiküszöbölése mellett azért is hasznosnak ígérkezik, mert a spinnek a klasszikus mechanikában nincs megfelelője, s ugyanakkor a skalár elektronok vizsgálata során adódó kvantummechanikai eredmények könnyebben összevethetők a kapcsolódó klasszikus formulákkal.

A k' hullámszámú és ϵ' polarizációjú szórt fényt az

$$a(x) = \left(\frac{4\pi \hbar c}{2k'_0} \right)^{1/2} \epsilon' (ae^{-ik' \cdot x} + a^+ e^{ik' \cdot x}) \quad (6.36)$$

kvantált vektorpotenciállal jellemezzük, a , ill. a^+ foton abszorpció és emissziós operátorok. A perturbált rendszer állapotai az

$$((i\partial - \epsilon A)^2 - \kappa^2)\Phi = W\Phi \quad (6.37)$$

Klein—Gordon-egyenletet elégítik ki, ahol

$$W = W(x) \equiv 2\epsilon a(x) \cdot (i\partial - \epsilon A(x)) - \epsilon^2 a^2(x), \quad (6.37a)$$

és lineárisan polarizált lézerefény esetében

$$A(x) = A_0 \epsilon \cos k \cdot x. \quad (6.37b)$$

A Green-függvény definíciója alapján (6.37) könnyen átírható a következő integrálegyenletre:

$$\Phi(x) = \Phi_i(x) + \int d^4x \mathcal{G}(x, y; A) W(y) \Phi(y), \quad (6.38)$$

$\Phi_i(x)$ (6.13) típusú elektronállapot. A (6.19a—b) és (6.14a—b) formulák alkalmazásával (6.38)-ból egy foton emissziójának átmeneti amplitúdójára Born-közelítésben az alábbi kifejezés adódik,

$$T_{fi} = -i \int dy \Phi_{pf}^{(+)*}(y) \langle 1 | W(x) | 0 \rangle \Phi_{pi}^{(+)}(x), \quad (6.39)$$

ahol

$$\langle 1 | W(x) | 0 \rangle = 2\epsilon \left(\frac{4\pi \hbar c}{2k'_0} \right)^{1/2} \epsilon' \cdot (i\partial - A(x)) e^{ik' \cdot x}. \quad (6.39a)$$

(6.39)-be $\Phi_{fi}^{(+)}$ -k (6.13)-ból (6.37b)-vel számított konkrét alakját beírva T_{fi} -t az (1.37) Jacobi—Anger-formula segítségével parciális amplitúdók inkoherens szuperpozíciójaként állíthatjuk elő,

$$T_{fi} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} T_{fi}^{(l)},$$

$$T_{fi}^{(l)} = -2\pi i \delta_4 \left(p_f + k' - p_i - lk + \frac{\epsilon^2 A_0}{4} \frac{(p_i - p_f) \cdot k}{p_f \cdot k p_i \cdot k} \right) t_{fi}^{(l)}, \quad (6.40)$$

$$t_{fi}^{(l)} \equiv \frac{2\epsilon \kappa (4\pi \hbar c)^{1/2}}{(2\kappa)^{1/2} (2p_f^0)^{1/2} (2k'_0)^{1/2}} \left\{ v(\epsilon \epsilon') \frac{1}{2} (C_{l+1} + C_{l-1}) - \right. \\ \left. - (n \epsilon') \frac{v^2}{4} \left[C_l + \frac{1}{2} (C_{l+2} + C_{l-2}) \right] \right\}, \quad (6.40a)$$

$v \equiv (\epsilon A_0 / \kappa)$ a már jól ismert intenzitásparaméter, és

$$C_l = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{l-2m} \left(\epsilon A_0 \frac{(p_f \epsilon)}{p_f \cdot k} \right) J_m \left(-\frac{\epsilon^2 A_0^2}{8} \frac{(p_i - p_f) \cdot k}{p_i \cdot k p_f \cdot k} \right). \quad (6.40b)$$

(Feltettük, hogy az elektron kezdetben nyugszik, vagyis $p_i = (\kappa, \mathbf{0})$.) Belátható, hogy a (6.40)-ben szereplő Dirac-delták a

$$p_f + k' = p_i + \frac{l}{w} k, \quad w \equiv 1 + \frac{v^2}{4} [1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n})] \quad (6.41)$$

négyesimpulzus-megmaradást fejezik ki, $\mathbf{s} = (\mathbf{k}'/|\mathbf{k}'|)$ a szórt sugárzás terjedési irányvektora, és $\mathbf{n} = (\mathbf{k}/|\mathbf{k}|)$. w az intenzitásfüggő elektron-driftből eredő Doppler-eltolódást írja le, ugyanúgy, mint a klasszikus esetben ((1.36a)). (6.41)-ből a következő frekvenciafeltétel adódik:

$$\omega' = \frac{l\omega}{u} \equiv \frac{l\omega}{1 + \left(2 \frac{l\omega}{\omega_c} + \frac{v^2}{2}\right) \sin^2 \frac{\Theta}{2}}, \quad (6.41a)$$

ahol $\omega_c \equiv (mc^2/\hbar)$ az elektron Compton-frekvenciája. A Compton-eltolódástól eltekintve (6.41a) egybeesik az (1.42) klasszikus eredménnyel. $T_{fi}^{(l)}$ (6.40) alakját használva egy l -ed rendű folyamat differenciális hatáskeresztmetszetére az alábbi kifejezést kapjuk:

$$\frac{d\sigma^{(l)}}{d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{2l}{u^2 v} \right)^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')^2 \quad (6.42)$$

ahol r_0 a klasszikus elektron sugár, és

$$\boldsymbol{\alpha} \equiv v B_l \boldsymbol{\epsilon} + \frac{[C_l + v(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) B_l]}{[1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n})]} \mathbf{n}. \quad (6.42a)$$

A B_l és C_l együtthatók pontosan úgy vannak definiálva mint az első fejezet (1.40a) és (1.39b—c) képleteiben. A szórt sugárzás polarizációs irányaira kiátlagolva (6.42)-ből az (1.44) klasszikus eredménnyel csaknem azonos hatáskeresztmetszetet kapunk,

$$\begin{aligned} \sum_{\text{pol}} \frac{d\sigma^{(l)}}{d\Omega} &= r_0^2 \left(\frac{2l}{u^2 v} \right)^2 |\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{s}|^2 = \\ &= r_0^2 \left(\frac{2l}{u^2 v} \right)^2 \left[\left(C_l \operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} + v B_l \cos \varphi \right)^2 + (v B_l \sin \varphi)^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Θ és φ \mathbf{s} polárszögei, ugyanúgy mint (1.44)-ben. Optikai frekvenciáknál $(\omega/\omega_c) \sim 10^{-5}$, ezért $u \sim w$, s ekkor (6.43) egybeesik (1.44)-gyel. Az intenzív fényszórást tehát a klasszikus elektrodinamika igen pontosan leírja, a kvantumos korrekciók nem játszanak lényeges szerepet.

7. Relativisztikus szabad elektron kölcsönhatása kvantált sugárzási térrel

Dolgozatunk jelen utolsó fejezetében reprezentáció-független módszerrel egzaktul megoldjuk az elektronból és a sugárzási tér egy kvantált módusából álló rendszer Dirac-egyenletét, s röviden megvizsgáljuk a megfelelő elektronpropagátort is. Végül az intenzív Compton-szórás teljesen kvantummechanikai tárgyalását adjuk, amellyel — a szemiklasszikus külsőtér-közelítéssel ellentétben — az intenzív módus kiürülését is leírhatjuk.

7.1. A „relativisztikus szabad elektron + kvantált $e. m.$ módus” rendszer egzakt állapotai

A Dirac-elektronból és az elektromágneses sugárzási tér egy kvantált módusából álló rendszer mozgásegyenlete

$$(i\gamma \cdot \partial - \varepsilon A - \kappa)\psi = 0, \quad (7.1)$$

ahol

$$A = c \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2} (\epsilon a e^{-ik \cdot x} + \epsilon^* a^+ e^{ik \cdot x}), \quad (7.1a)$$

V a kvantálási térfogat és az a, a^+ amplitúdók az $[a, a^+] = 1$ felcserélési relációt elégítik ki. Az egyszerűség kedvéért cirkuláris polarizációt tételezünk fel, tehát $\epsilon^2 = \epsilon \epsilon^{*2} = 0$, $\epsilon^* \cdot \epsilon = -1$, és így $A^2 \sim (a^+ a + 1/2)$. ψ az elektron- és módus-állapotok szorzatterében van. A (7.1) egyenletet először Berson (1969) oldotta meg, sőt ugyan-csak ő az azonos irányban terjedő tetszés szerinti számú módus szuperpozíciójára is megadta a megoldást (Berson 1970). Sajnos — mivel az a és a^+ operátorok differenciáloperátor reprezentációját használta — eredményei nagyon bonyolult alakúak, s ezért konkrét szórásaszámítások tárgyalásához nagyon nehézkesen alkalmazhatók. Mi a következőkben (7.1) áttekinthető, reprezentáció-független algebrai megoldását adjuk, amely az alkalmazások szempontjából sokkal előnyösebb mint a Berson-féle.

(7.1) megoldása érdekében először a

$$\psi = e^{ik \cdot x} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \Phi \quad (7.2)$$

transzformáció segítségével kiküszöböljük a vektorpotenciál tér- és időfüggését,

$$\left[i\gamma \cdot \partial - k \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - g (\xi a + \xi^* a^+) - \kappa \right] \Phi = 0, \quad (7.2a)$$

$$g \equiv (\alpha \lambda V^{-1})^{1/2},$$

(a g csatolási állandó kifejezésében $\alpha \equiv (e^2/\hbar c)$ a finomszerkezeti állandó). Ezután Φ -t a következő alakban kereshetjük,

$$\Phi = \Phi_p e^{-ip \cdot x}, \quad (7.3)$$

ahol p egyelőre tetszőleges négyesimpulzus. (7.3)-at (7.2a)-ba írva Φ_p -re az alábbi egyenlet adódik

$$\left[p - k \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - g (\xi a - \xi^* a^+) - \kappa \right] \Phi_p = 0 \quad (7.3a)$$

(7.3a) diagonalizálásához a negyedik fejezetben bemutatott D -transzformációs eljárás még nem megfelelő, mert a bozonoperátoroknak különböző mátrix együtthatói vannak. Ez a probléma megoldható, ha Φ_p -t a ((6.5) Volkov-állapotokra emlékeztető) következő alakban vesszük fel:

$$\Phi_p = \left[1 + \frac{gk}{2k \cdot p} (\xi a + \xi^* a^+) \right] \chi_p \equiv V \chi_p. \quad (7.4)$$

Megjegyezzük, hogy a (7.4) alak Majorana-reprezentációban (7.3a)-ból automatikusan kiadódik (Bergou és Varró 1981b). (7.3a)-t

$V^{-1} = \left[1 - \frac{g^k}{2k \cdot p} (\not{\epsilon} a + \not{\epsilon}^* a^+) \right]$ -val balról szorozva kapjuk, hogy

$$\left\{ p - k \left[\left(1 + \frac{g^2}{k \cdot p} \right) \left(a + a + \frac{1}{2} \right) + g \left(\frac{p \cdot \epsilon}{p \cdot k} a + \frac{p \cdot \epsilon^*}{p \cdot k} a^+ \right) \right] - \right. \\ \left. - \kappa + \frac{g^2}{2k \cdot p} \frac{1}{2} (\not{\epsilon} \not{\epsilon}^* - \not{\epsilon}^* \not{\epsilon}) k \right\} \chi_p = 0 \quad (7.4a)$$

Ezzel elértük, hogy a bozonoperátoroknak közös mátrixkoefficiense van, és így (7.4a)-ból az a -ban és a^+ -ban lineáris tagokat a

$$D_\sigma \equiv e^{\sigma a^+ - \sigma^* a} \quad (7.5)$$

transzformációval a már ismert módon eliminálhatjuk. Ha

$$\sigma = - \frac{p \cdot \epsilon^*}{pk \cdot + g^2} \quad (7.5a)$$

akkor a megoldás

$$\chi_p = w D_\sigma |n\rangle, \quad (7.6)$$

ahol $|n\rangle$ fotonszámsajátállapot, és a w bispinor kielégíti a következő egyenletet

$$\left[p - k \left(1 + \frac{g^2}{p \cdot k} \right) \left(n + \frac{1}{2} - |\sigma|^2 \right) + \frac{g^2}{2p \cdot k} \frac{1}{2} (\not{\epsilon} \not{\epsilon} - \not{\epsilon}^* \not{\epsilon}^*) k - \kappa \right] w = 0. \quad (7.6a)$$

Az ún. projekciós technikát (Mitter 1975) használva bebizonyítható (Bergou és Varró 1981b), hogy

$$\frac{1}{2} (\not{\epsilon} \not{\epsilon}^* - \not{\epsilon}^* \not{\epsilon}) k w = -k w. \quad (7.6b)$$

Ennek alapján (7.6a)-t a következő alakra hozhatjuk

$$(q - \kappa) w = 0, \quad (7.6c)$$

ahol

$$q \equiv p - k g_p(n), \quad g_p(n) \equiv \left(1 + \frac{g^2}{p \cdot k} \right) \left(n + \frac{1}{2} - |\sigma|^2 \right) + \frac{g^2}{2k \cdot p}. \quad (7.6d)$$

$k^2 = 0$ és $k \cdot \epsilon = 0$ alapján megmutatható, hogy

$$p = q + k g_q(n). \quad (7.6e)$$

(7.6c) szerint q a szabad tömeghéjon levő négyesimpulzus és (6.3a)-nak megfelelően $w = u_{qs}^{(+)}$ szabad bispinor. (7.2), (7.3), (7.6) és (7.6e) szerint (7.1) megoldásának végső alakja

$$\psi = e^{ik \cdot x \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)} \left[1 + \frac{g \cdot k}{2k \cdot p} (\not{\epsilon} a + \not{\epsilon}^* a^+) \right] u_{qs} D_\sigma |n\rangle e^{-i[q + k g_q(n)] \cdot x}. \quad (7.7)$$

(7.7) statisztikus tulajdonságai vizsgálatához itt nincs helyünk, csak annyit jegyzünk meg, hogy q , ill. n lényegében az elektron négyesimpulzusának, ill. a fotonszámnak a várható értéke a ψ állapotban.

Az imént bemutatott diagonalizálási eljárással a megfelelő, inhomogén Dirac-, ill. Klein—Gordon-egyenlet is megoldható. Illusztrációképpen most megadjuk a „skalár elektron + kvantált e. m. módus” rendszer propagátorát,

$$\hat{\mathcal{G}}(x, y) = e^{ik \cdot x \left(a + \frac{1}{2}\right)} \left(\int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} D_\sigma \frac{e^{-ip \cdot (x-y)}}{p^2 - 2p \cdot k f_p(a+a) - \kappa^2} D_\sigma^{-1} \right) e^{-ik \cdot y \left(a + \frac{1}{2}\right)}, \quad (7.8)$$

ahol $f_p(a+a) \equiv \left(1 + \frac{g^2}{p \cdot k}\right) \left(a+a + \frac{1}{2} - |\sigma|^2\right)$, a többi jelölés ugyanaz mint fentebb volt.

$\hat{\mathcal{G}}$ impulzusreprezentációbeli $\langle l+n | \hat{\mathcal{G}}(p, q) | n \rangle$ mátrix elemeiről a (4.17) Hilb-formula alkalmazásával belátható, hogy az $n, V \rightarrow \infty$ ($(n/V) \equiv \varrho$ állandó) határesetben megegyeznek a megfelelő szemiklasszikus Green-függvény ((6.23)) nemdiagonális mátrixelemeivel

$$\lim_{\substack{n, V \rightarrow \infty \\ \varrho = \text{állandó}}} \langle l+n | \hat{\mathcal{G}}(p, q) | n \rangle = (2\pi)^4 \delta_2(p + lk - q) e^{il\varphi} \cdot \sum_{r=-\infty}^{\infty} \frac{J_{l+r}(\zeta) J_r(\zeta)}{(p - rk)^2 - \kappa_*^2}, \quad (7.9)$$

$$\zeta, \varphi, \kappa_* \equiv (6.23a-b), \quad a_0 \leftrightarrow \frac{c}{\omega} (2\pi \varrho \hbar \omega)^{1/2}. \quad (7.9a)$$

A klasszikus lézrefénybeli elektronátmenetek tehát a kvantált módus magasan gerjesztett állapotai között átmeneteknek felelnek meg. *Fried és Eberly* (1964), valamint *Reiss és Eberly* (1966) a Feynman diagramok szemiklasszikus határesetben való összegzésekor (7.9)-cel ekvivalens eredményt kaptak (lásd még *Eberly és Reiss* 1966). A másik szélsőséges eset a vákuum—vákuum átmenet, amelynek leírására (7.8) szintén alkalmas (ellentétben a szemiklasszikus Green-függvénnyel). A vákuumban mozgó skalár elektron propagátora

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{G}}(p, q) | 0 \rangle = (2\pi)^4 \delta_4(p - q) e^{-|\sigma|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(|\sigma|^{2m}/m!)}{(p - m\tilde{k})^2 - \kappa_{**}^2}, \quad (7.10)$$

ahol

$$\tilde{k} \equiv k \left(1 + \frac{g^2}{p \cdot k}\right), \quad \kappa_{**}^2 = \kappa^2 + 2(p \cdot k + g^2)|\sigma|^2 + g^2. \quad (7.10a)$$

(7.10) alapján a $(p - m\tilde{k})^2 = \kappa_{**}^2$ egyenlet által meghatározott pólusok a virtuális fotonokkal való kölcsönhatásról adnak számot.

7.2. Kvantált elektromágneses sugárzás nemlineáris Compton-szórása

A Compton-szórás tárgyalásakor a szabad elektron és a sugárzási tér két módusának kölcsönhatását kell figyelembe vennünk. Az imént megkapott (7.7) egzakt megoldások birtokában a $\{k, \epsilon\}$ módussal vett kölcsönhatást tetszőleges rendben tanulmányozhatjuk, tehát leírhatunk olyan folyamatokat, amelyek során a $\{k, \epsilon\}$ módus fotontartalma tetszés szerinti értékkel változhat, miközben a szórt fény $\{k', \epsilon'\}$ módusában egy „új” foton jelenik meg. Ez a nemlineáris Compton-szórás, amelyet a 6. fejezetben skalár elektronokra szemiklasszikus módszerrel vizsgáltunk. Az alább közlendő eljárás a módus kiürüléséről is számot ad (erre a szemiklasszikus külsőtér-közelítés nem alkalmas).

A nemlineáris Compton-szórás átmeneti amplitúdója

$$T_{fi} = -ig' \int d^4x \bar{\psi}_f \not{\epsilon}' e^{ik' \cdot x} \psi_i, \quad (7.11)$$

ahol $g' = (\alpha\lambda' V^{-1})^{1/2}$ g -vel analóg módon definiált csatolási állandó, amely a $\{k', \epsilon'\}$ módussal való kölcsönhatást írja le. ψ_i és ψ_f (7.7) típusú kezdeti és végállapot. Az integrálás elvégzése után T_{fi} a következő alakra hozható,

$$T_{fi} = -ig'(2\pi)^4 \delta_4(p' + k' - p) t_{fi} \quad t_{fi} = \bar{\Phi}_p \not{\epsilon}' \Phi_p. \quad (7.12a-b)$$

A (7.12a)-ban szereplő Dirac-delták a négyesimpulzus megmaradást fejezik ki, részletesen kiírva

$$q' + kg_{q'}(n') + k' = q + kg_q(n). \quad (7.13)$$

(7.13)-ból a szórt sugárzás ω' frekvenciája egy másodfokú egyenlet megoldásaként adódik, amely meglehetősen komplikált formájú. Ha az egyenletben a g^2 rendű tagot elhagyjuk, akkor ω' -t egy lineáris egyenletből határozhatjuk meg,

$$\omega' = \frac{l\omega + \omega_c(v^2/4)\delta}{1 + \left(2l \frac{\omega}{\omega_c} + \frac{v^2}{2}\right) \sin^2 \frac{\Theta}{2}}, \quad (7.13a)$$

ahol $\delta \equiv (n - n')/n$ a kiürülési tényező, $l = n - n'$ a folyamat rendje, $\Theta = (\mathbf{k} \angle \mathbf{k}')$ a szórási szög, ω_c az elektron Compton-frekvenciája és $v = (g/\kappa)(2n+1)^{1/2}$ a kezdeti fotonszám várható értéknek megfelelő intenzitásparaméter. Ha a móduskiürülés elhanyagolható ($\delta \sim 0$) akkor (7.13a) egybeesik a (6.41a) frekvenciafeltétellel (ha ott v -t a klasszikus

$A_0 = \frac{c}{\omega}(2\pi\hbar\varrho)^{1/2}$ amplitúdójú vektorpotenciálból számolható $\frac{eA_0}{mc^2}$ intenzitásparaméternek tekintjük). A (7.12b)-ben definiált t_{fi} amplitúdó a normálási faktoroktól eltekintve a következőképpen írható

$$t_{fi} = \bar{u}_{q's'} M u_{qs} \quad (7.14)$$

ahol

$$M \equiv B_0 \not{\epsilon}'' + \frac{g}{2p' \cdot k} (\not{\epsilon} B_- + \not{\epsilon}^* B_+) \not{k} \not{\epsilon}'' + \frac{g}{2q \cdot k} \not{\epsilon}'' \not{k} (\not{\epsilon} B_- + \not{\epsilon}^* B_+), \quad (7.14a)$$

$$\epsilon'' \equiv \epsilon' - \frac{k \cdot \epsilon'}{k \cdot k'} k, \quad B_0 \equiv \langle n' | D_{\sigma'}^{-1} | n \rangle, \quad (7.14b-c)$$

$$B_- \equiv \langle n' | D_{\sigma'}^{-1} a | n \rangle, \quad B_+ \equiv \langle n' | D_{\sigma'}^{-1} a^+ | n \rangle \quad (7.14d-e)$$

(A (7.14a—e) képletek laboratóriumi rendszerben érvényesek, ahol $q=(\kappa, \mathbf{0})$, tehát (7.5a) szerint $\sigma=0$, vagyis $D_\sigma=1$.) Az n , $V \rightarrow \infty$ ($n/V \equiv \varrho$, l rögzített) határesetben (ekkor $\delta=0$) a fent definiált B együtthatók teljesen megegyeznek a megfelelő szemi-klasszikus kifejezésekkel (az utóbbiakat illetően lásd pl. *Brown és Kibble* 1965), ezért ezt az esetet itt tovább nem vizsgáljuk.

A másik szélsőséges esetben a $\{k, \epsilon\}$ módus kiürülése maximális ($n'=0 \rightarrow \delta=1$), ekkor

$$\langle |t_{fi}|^2 \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{n\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{n\omega} - 2 + 4|\epsilon\epsilon'|^2 \right) \times \\ \times \frac{1}{n!} \left(\frac{ng}{\kappa} \right)^{2n} |s\epsilon|^2 \exp \left\{ - \left(\frac{ng}{\kappa} \right)^2 |s\epsilon|^2 \right\}, \quad (7.15)$$

ahol $\langle \rangle$ a kezdeti elektronspinekre vett átlagolást és a végső spinekre vett összegzést jelent és $s \equiv \mathbf{k}'/|\mathbf{k}'|$. (7.15) jobb oldala a folyamatra vonatkozó $\frac{1}{4} \left(\frac{n\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{n\omega} - 2 + 4|\epsilon\epsilon'|^2 \right)$ Klein—Nishina faktortól az

$$\frac{1}{|s\epsilon|^2} \frac{(\mu^2 n^2)^n}{n!} e^{-\mu^2 n^2} \left(\mu \equiv \frac{g}{\kappa} |s\epsilon| \right) \quad (7.15a)$$

szorzóval különbözik, s ez a móduskiürülés egzakt figyelembevételének következménye. Megjegyezzük, hogy az $e^{-\mu^2 n^2}$ tényező (amely az n -fotonos Compton-szórás szokásos perturbatív tárgyalásakor nem adódik ki) biztosítja, hogy az átmeneti valószínűség $n \rightarrow \infty$ határesetben is véges maradjon.

A jelen fejezet alapján is megállapíthatjuk, hogy a $\{k, \epsilon\}$ módus magasan gerjesztett állapotai között átmenetek — ha a kiürülés elhanyagolható — szemi-klasszikus módszerrel kielégítően tárgyalhatók, de ha a kiürülés számottevő, akkor a külső térközelítést el kell vetnünk és a Volkov-állapotok helyett a (7.7) típusú állapotokkal kell számolnunk.

Összefoglalás

Dolgozatunk első fejezetében a szabad elektronon történő fényszórás egzakt klasszikus elektrodinamikai tárgyalása segítségével illusztráltuk, hogy a szórásfolyamatokban a beeső fény intenzitása jelentős szerepet játszhat. Láttuk, hogy a szórt fényben megjelenő felharmonikusok frekvenciái az elektron-drift következtében intenzitásfüggő eltolódást szenvednek, és hogy pl. az alapharmonikus pontos differenciális hatáskeresztmetszete — a beeső fény intenzitásától függően — számottevően elérhet a szokásos Thomson-féle hatáskeresztmetszettől.

A második fejezetben az intenzív fényt reprezentáló külső monokromatikus elektromágneses síkhullám hatásainak kitett pontszerű elektron kvantált sugárzási terét analizáltuk, s egyben az első fejezet klasszikus eredményeinek mélyebb megalapozását adtuk.

Ezek után rátértünk a lézerfényvel kölcsönható nemrelativisztikus szabad elektronok kvantummechanikai tanulmányozására. Először dipólközelítésben, majd egzaktul megoldottuk a megfelelő Schrödinger-egyenletet, s a megoldások segítségével megvizsgáltuk a „szabad elektronok optikailag indukált sávszerkezete” létezésének fizikai feltételeit. Ennek kapcsán elemeztük a Schrödinger-egyenlet az intenzív tér

elektrodinamika problémáira való alkalmazhatóságát. A fejezet második részében a szabad elektron lézerfény jelenlétében lehetséges többfotonos átmeneteinek leírására általánosan használt szemiklasszikus módszer működésének illusztrálása érdekében kiszámítottuk a sztatikus háttérpotenciálon szóródó elektron nemlineáris kényszerített fékezési sugárzásának differenciális hatáskeresztmetszetét. Elemeztük a kapcsolódó kísérleti eredményeket is, amelyek — legalábbis kvalitatív — leírására az elmélet alkalmasnak bizonyult. Rámutattunk, hogy a szórásfolyamathoz tartozó megmaradási törvények tulajdonképpen az elektron kvantummechanikai rezonanciáit fejezik ki, s így fotonokkal való értelmezésük felesleges.

A negyedik fejezetben egzaktul megoldottuk a „nemrelativisztikus elektron + foton” rendszer mozgásegyenletét dipólközelítésben, s az így kapott állapotokat használva először megvizsgáltuk, hogy az elektronnal való kölcsönhatás hogyan befolyásolja a vizsgált e. m. módus fotonstatistikáját. Ezután kiszámítottuk a kvantált sugárzási térben lejátszódó többfotonos kényszerített fékezési sugárzás differenciális hatáskeresztmetszetét. Így sikerült megalapoznunk a nemlineáris folyamatokra vonatkozó szemiklasszikus eredmények interpretálásakor általánosan elfogadott (de eddig megalapozatlanul használt) intuitív foton-képet. Egyben az intenzív módus kiürülését is figyelembe véve a szemiklasszikus külső tér közelítésnél pontosabb leírást adtunk.

Az ötödik fejezetben a szabad elektronok többfotonos folyamataival kapcsolatban eddig végzett kísérletek eredményeinek elméleti diszkutálása után a lézerfényben lezajló elektron—elektron szórást vizsgáltuk. Meghatároztuk az elektronok kölcsönhatását leíró effektív potenciál analitikus alakját, amely számot ad a lézerfényben levő elektronok (több kutató által már régóta sejtett) vonzásáról. Röviden kitértünk a rugalmas szórásnál szokásosan szereplő Rutherford-rezonancia mellett fellépő belső rezonanciák elemzésére is.

A hatodik fejezetben az e. m. síkhullámokkal kölcsönható szabad relativisztikus elektronok Dirac- és Klein—Gordon-egyenleteinek megoldásait, a Volkov-féle állapotokat, és a megfelelő Green-függvényeket (propagátorokat) tanulmányoztuk. Bebizonyítottuk a Volkov-állapotok térszerű hipersíkon vett ortogonalitását. Ezt követően az intenzív tér elektrodinamika konzekvens, Furry-képbeli felépítését vázoltuk, majd meghatároztuk a relativisztikus elektronok nemlineáris kényszerített fékezési sugárzása és a skalár elektronon történő intenzív Compton-szórás differenciális hatáskeresztmetszetét. Ezek az eredmények a harmadik, ill. első fejezetben kapott megfelelő formulák általánosítását jelentik.

A hetedik fejezetben reprezentáció-független módszerrel egzaktul megoldottuk az elektronból és az e. m. sugárzási tér egy kvantált módusából álló rendszer Dirac- és Klein—Gordon-egyenletét, s röviden megvizsgáltuk a propagátorokat is. Végül a kvantált fény többfotonos Compton-szórásának tárgyalása során elemeztük móduskiürülés szerepét, valamint a Klein—Nishina-képlet általánosítását adtuk.

Befejezésképpen felsoroljuk az intenzív tér elektrodinamika néhány főbb, eddig még megoldatlan problémáját.

a) Az e. m. síkhullámokkal kölcsönható elektron mozgásegyenleteihez tartozó kezdeti-értékproblémára eddig még nem sikerült megnyugtató megoldást találni.

b) Nincs még bebizonyítva a Volkov-állapotok térszerű hipersíkon vett teljessége.

c) A fény-elektron kölcsönhatás leírásakor az intenzív tér elektrodinamikában eddig a fényt térben és időben végtelen kiterjedésű síkhullámmal reprezentálták. A va-

lóságban rendelkezésre álló fényforrásokat figyelembe véve ez első pillantásra nagymértékű idealizációnak tűnik.

Eddig még megoldatlan feladat az elektronok realisabb (pl. Gauss) amplitúdó-profilú hullámokkal való kölcsönhatásának egzakt analízise.

d) Az intenzív tér elektrodinamika jellegzetes módszere azon alapul, hogy az „elektron+intenzív módus” rendszer mozgásegyenletei egzakt megoldásainak birtokában a különböző szórásfolyamatok leírásakor az egyéb hatásokat (pl. egy ion Coulomb-terét vagy egy másik e. m. módust) perturbációs számítással kezeljük.

Fontos eredmény lenne, ha sikerülne meghatározni az „e. m. módus+Coulomb-ter+elektron” rendszer, vagy a „két (vagy több) e. m. módus+elektron” rendszer pontos állapotait.

Az imént bemutatott problémák elemzése dolgozatunk célkitűzésein túl mutat, ezek vizsgálatát a jövőben tervezzük.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton is szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, *dr. Bergou Jánosnak*, akivel az együtt-dolgozás számomra nagy öröm, s akinek szakmai és baráti támogatását mindvégig élveztem.

Dr. Siklós Tivadarnak, a Szilárdtest-elméleti Osztály vezetőjének, aki munkámat folyamatosan figyelemmel kísérte és hasznos tanácsokkal látott el.

Dr. Kroó Norbertnek, akinek munkám iránti élénk érdeklődése számomra sokat jelentett.

Dr. Farkas Győzőnek és Horváth Zoltánnak, akikkel a szabad elektronok és intenzív fény kölcsönhatásáról sok érdekes diszkussziót folytattunk.

IRODALOM

- Abramowitz M. and Stegun I. A.*, 1964 Handbook of Mathematical Functions (London: Dover)
- Alperin M.*, 1944 ZSETF 14, 3
- Arcscott F. M.*, 1964 Periodic differential equations (Oxford: Pergamon Press)
- Becker W.*, 1977 Physica 87A, 601
- Becker W., Meckbach R. and Mitter H.*, 1979 J. Phys. A: Math. Gen. 12, 799
- Becker W. and Mitter H.*, 1979 J. Phys. A: Math. Gen. 12, 2407
- Beers B. and Nickle H. H.*, 1972 J. Math. Phys. 13, 1592
- Bergou J.*, 1975 Acta Phys. Hung. 39, 185
- Bergou J.*, 1976 Acta Phys. Hung. 40, 55
- Bergou J.*, 1980 J. Phys. A: Math. Gen. 13 2817
- Bergou J. and Varró S.*, 1980a J. Phys. A: Math. Gen. 13, 2823
- Bergou J. and Varró S.*, 1980b J. Phys. A: Math. Gen. 13, 3553
- Bergou J. and Varró S.*, 1981a J. Phys. A: Math. Gen. 14, 1469
- Bergou J. and Varró S.*, 1981b J. Phys. A: Math. Gen. megjelenik a szeptemberi kötetben, Preprint KFKI—1980—54 (Budapest)
- Bergou J., Varró S. and Fedorov M. V.*, 1981a J. Phys. A: Math. Gen. megjelenik a szeptemberi kötetben, Preprint KFKI—1980—53 (Budapest)
- Bergou J., Varró S. i Fjodorov M. V.*, 1981b közlésre elfogadva a ZSETF-ben
- Berszon I. Ja.*, 1969 ZSETF 56 1627
- Berszon I. Ja.*, 1970 Izv. AN Latv. SSR No3 3
- Berson I. Ya. and Valdmanis J.*, 1973 J. Math. Phys. 14, 1481
- Bjorken J. D. and Drell S. D.*, 1964 Relativistic Quantum Mechanics (New York: McGraw-Hill)
- Bloch F. and Nordsieck A.*, 1937 Phys. Rev. 52, 54
- Bös J., Brock W., Mitter H. and Schott Th.*, 1979a J. Phys. A: Math. Gen. 12, 715
- Bös J., Brock W., Mitter H. and Schott Th.*, 1979b J. Phys. A: Math. Gen. 12, 2573
- Brown L. S. and Goble R. L.*, 1968 Phys. Rev. 173, 1505
- Brown L. S. and Kibble T. W. B.*, 1964. Phys. Rev. 133, A705
- Bunkin F. V. i Fjodorov M. V.*, 1965 ZsETF 49, 1215
- Bunkin F. V., Kazakov A. E. i. Fjodorov M. V.*, 1972 Usp. Fiz. Nauk 107, 559
- Cronström C. and Noga M.*, 1977 Phys. Lett. 60A, 137

- Eberly J. H., 1968 Proc. Int. Conf. on Optical Pumping and Atomic Line Shape (OPALS) 311 (Warsaw)
- Eberly J. H., 1969 Progress in Optics VII 361 (North-Holland)
- Eberly J. H. and Reiss H. R. 1966 Phys. Rev. 145, 1035
- Ehlotzky F., 1978 Opt. Comm. 27, 65
- Erdélyi A., 1953 Higher Transcendental Functions (New York: McGraw-Hill)
- Faisal F. H. M., 1973 J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 6, L312
- Farkas Gy., 1978 Multiphoton Processes (Proc. Int. Conf. at the University of Rochester, Rochester N. Y., June 6—9, 1977) 81 (New York, London: J. Wiley & Sons, Inc.)
- Frantz L. M., 1965 Phys. Rev. 139B 1326
- Fried Z., 1963 Phys. Lett. 3, 349
- Fried Z. and Eberly J. H., 1964 Phys. Rev. 136B 871
- Glauber R. J., 1963a Phys. Rev. 130, 2529
- Glauber R. J., 1963b Phys. Rev. 131, 2766
- Goldman I. I., 1964 Phys. Lett. 8, 103
- Gontier Y. and Rahman N. K., 1974 Lett. al Nouvo Cim. 9, 537
- Gyenyiszov M. M. i Fjodorov M. V., 1967 ZsETF 53, 1342
- Jackson J. D., 1963 Classical Elektrodynamics (New York, London: J. Wiley & Sons, Inc.)
- Jauch J. M. and Rohrlich F., 1955 The Theory of Photons and Electrons (Cambridge, Mass: Addison Wesley)
- Jung Ch., 1980 Phys. Rev. A 21, 408
- Keldis L. V., 1964 ZsETF 47, 1945
- Kibble T. W. B., 1965 Phys. Rev. 138B 740
- Kohler R. H., 1966 Phys. Rev. 151, 165
- Körmendi F., 1977 J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 10, 1633
- Körmendi F., 1980 Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy Preprint (Beograd)
- Kroll N. M. and Watson K. M., 1973 Phys. Rev. A 8, 804
- Krüger H. and Jung Ch., 1978 Phys. Rev. A 17, 1706
- Krüger H. and Jung Ch., 1978 Phys. Rev. A 17, 1706
- Landau L. D. és Lifsic E. M., 1976 Elméleti Fizika II: Klasszikus erőkerek (Budapest: Tankönyvkiadó)
- Leubner C., 1978 Astron. Astrophys. 69, 149
- Leubner C. and Strohmayer E., 1981 J. Phys. A: Math. Gen. 14, 509
- Lompré L. A., Mainfray G., Manus C. and Farkas Gy., 1979 Phys. Rev. Lett. 43, 1243
- Mandel L., 1976 Progress in Optics XIII, 27 (North-Holland)
- Mitter H., 1975 Acta Phys. Aust. Suppl. XIV 397
- Narozsnyij N. B., Nyikisov A. I. i Ritusz V. I., 1964 ZsETF 47, 931
- Neville R. A. and Rohrlich F., 1971a Nuovo Cim 1A, 625
- Neville R. A. and Rohrlich F., 1971b Phys. Rev. D3, 1692
- Neville R. A., 1976 Canad. J. Phys. 54, 2246
- Nickle H. H., 1966 J. Math. Phys. 7, 1497
- Nyikisov A. I. i Ritusz V. I., 1964 ZsETF 46, 776
- Oleinyik V. P., 1967a ZsETF 52, 1049
- Oleinyik V. P., 1967b ZsETF 53, 1997
- Oleinyik V. P. i Szinyak V. A., 1975 Opt. Comm. 14, 179
- Osborn R. K., 1972 Phys. Rev. A5, 1660
- Reiss H. R. and Eberly J. H., 1966 Phys. Rev. 151, 1058
- Ritusz V. I., 1979 Kvantovaja elektrodinamika javlenij v intenzivnom polje (Trudü Fiz. Inszt. im. Lebegyeva 111) (Moszkva, Nauka)
- Ritusz V. I., 1972 Ann. Phys. (N. Y.) 69, 555
- Rohrlich F., 1965 Classical Charged Particle (Read. Mass: Addison-Wesley)
- Rosenberg L., 1979 Phys. Rev. A 20, 1352
- Schlessinger L. and Wright J., 1979 Phys. Rev. A 20, 1934
- Schlessinger L. and Wright J., 1980 Phys. Rev. A 22, 2529
- Tanabe K., 1973 J. Math. Phys. 14, 618
- Vachaspati, 1962 Phys. Rev. 128, 664, ibid 130, 2598 (1963)
- Volkov D. M., 1935 Z. für Phys. 94, 250
- Weingartshofer A., Holmes J. K., Caudle G., Clarke E. M. and Krüger H., 1977 Phys. Rev. Lett. 39, 269
- Weingartshofer A., Clarke E. M., Holmes J. K. and Jung. Ch. 1979 Phys. Rev. A 19, 2371

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1982. X. 14. — Terjedelem: 8,75 (A/5 ív)
83-4502 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

Ára: 15,— Ft
Előfizetés kötetenként: 90,— Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Kovács István és Szenes György: Sugárzási károsodás fémekben</i>	357
<i>Varró Sándor: Szabad elektronok és intenzív fény kölcsönhatásának elméleti vizsgálata</i>	399

307.226

V

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

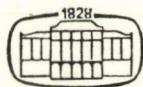
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXI. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1983

9

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGNYOMATÉKOK MÉRÉSE, BELSŐ MÁGNESES TEREK VIZSGÁLATA COULOMB-GERJESZTÉSEL*

SZŐKEFALVI-NAGY ZOLTÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet
RMKI, Biofizikai Team

TARTALOM

1. Bevezetés	457
2. A vizsgált problémák előzményei	459
2.1. A vanádium probléma	459
2.2. A ródium probléma	462
3. A mérési módszer elvei	465
3.1. A Coulomb-gerjesztés hatáskeresztmetszete	465
3.2. A Coulomb-gerjesztést követő γ -sugárzás szögeloszlása	466
3.3. A mágneses tér hatása a szögeloszlásra	467
3.4. A nem megfigyelt közbenső sugárzás hatása	469
3.5. A belső mágneses terek tulajdonságai	472
4. Kísérleti rész	476
4.1. A mérőberendezés leírása	476
4.2. A mérési adatok kiértékelése	479
4.3. Az elvégzett mérések	482
4.3.1. Szögeloszlás mérések	482
4.3.2. A céltárgy mágnesezettségének vizsgálata	483
4.3.3. Szögelfordulás mérések	484
4.3.4. A gyorsító nyálábeltérülésének vizsgálata	486
4.3.5. Az elágazási arány vizsgálata	487
5. Az eredmények diszkussziója	488
5.1. A Fe-V mérések	489
5.2. A Fe-Rh mérések	493
6. Összefoglalás	501
Irodalom	501

1. Bevezetés

Ez a dolgozat gerjesztett állapotban levő atommagok mágneses nyomatékának mérésével foglalkozik. A mágneses nyomaték mérések azon a tényen alapszanak, hogy egy mágneses sajátságokkal rendelkező rendszer mágneses térbe helyezve azzal kölcsönhatásba lép, a kölcsönhatás valamely alkalmas következményét kimérve meghatározhatjuk a rendszer mágneses tulajdonságait. Az általunk vizsgált esetben ez a következőket jelenti: A vizsgálni kívánt magokat néhány MeV energiára felgyorsított protonokkal bombázva gerjesztett állapotba hozzuk. A gerjesztett állapotok az állapotra jellemző τ közepes élettartamig élnek, majd γ -sugárzás kibocsátásával alapállapotba bomlanak. Az így észlelt γ -sugárzás az esetek többségében nem izotrop, hanem a gerjesztési folyamatban szereplő impulzusmomentum értékektől függő alakú

* Érkezett: 1981. dec. 14.

szögeloszlást mutat a gerjesztő protonnyaláb irányához képest [1]. Amennyiben a gerjesztett állapotban levő magot valamilyen kölcsönhatás éri, (például mágneses tér hat rá), a kölcsönhatás módosítja a szögeloszlást. A bombázó nyaláb és a kibocsátott γ -kvantum iránya által meghatározott síkra merőleges homogén mágneses tér hatása például abban nyilvánul meg, hogy a szögeloszláskép elfordul [2]. Az elfordulás szöge, $\Delta\theta$, arányos a gerjesztett állapot élettartamával, mágneses nyomatékával és a mágneses tér erősségével, pontosabban kicsiny szögelfordulás esetén

$$|\Delta\theta| = \frac{\mu B \tau}{\hbar I},$$

ahol \hbar a 2π -vel osztott Planck állandó, μ , I és τ pedig rendre a gerjesztett állapot mágneses nyomatéka, spinje és közepes élettartama, míg B a mágneses tér erőssége. Ha az élettartam nagyon rövid, akkor nagyon nagy mágneses térre van szükség ahhoz, hogy mérhető szögelfordulást kapjunk. Ötven milliradián szögelfordulás még jól mérhető, ekkora elfordulás eléréséhez egy 10^{-9} sec élettartamú gerjesztett állapot esetén 1 T erősségű tér szükséges, ha egységnyi μ/I viszonyt tételezünk fel. Ilyen nagyságrendű terek előállíthatók elektromágnesekkel, az ilyen módon végrehajtott méréseket külső teres perturbált szögeloszlás méréseknek nevezzük. Ha 10^{-10} — 10^{-12} sec élettartamú állapotokat szeretnénk mérni, akkor nagyságrendekkel nagyobb mágneses terekre van szükségünk, melyek külső mágnesekkel már nem állíthatók elő. Ismeretes azonban, hogy ferromágneses anyagokban a kristályt alkotó ionok magjai helyén igen nagy, 10^3 T nagyságrendű úgynevezett belső, vagy hiperfinom mágneses terek léphetnek fel [3], ha ezen terek perturbáló hatását használjuk fel, úgy belső teres vagy hiperfinom kölcsönhatáson alapuló mérést végzünk. Ebben a dolgozatban ilyen típusú mérésekkel foglalkozunk. A belső terek szerepe azonban nem korlátozódik csupán az elektromágnesek helyettesítésére. Míg ugyanis elektromágnes használatakor biztonságosan meg tudjuk mondani, hogy a vizsgált atommag helyén mekkora térerősség hat, belső terek esetében korántsem ilyen egyszerű a helyzet. Olyan megbízható elmélet, amely meg tudná mondani, hogy egy adott összetételű ferromágneses kristályban levő, vagy oda bejuttatott atom magja helyén pontosan mekkora hiperfinom tér hat, pillanatnyilag még nem áll rendelkezésre. Ezért, ha a mágneses nyomatékot akarjuk meghatározni, a belső tér nagyságát és irányát más, független mérésből kell vennünk. Ugyanakkor a szögelfordulást megadó összefüggést a szilárdtestfizikus szemével nézve azt vehetjük észre, hogy a perturbált szögeloszlás módszer (szokásos angol rövidítéssel PAD) nem csupán magfizikai ismeretek bővítésére használható, hanem jól alkalmazható szilárdtestfizikai kutatásokban is. Nevezetesen, ha a mágneses nyomaték értéke ismert, akkor a belső mágneses teret tudjuk a szögelfordulás megméréseivel meghatározni. A dolgozatban ismertetett vizsgálatok éppen ezért kettős célkitűzéssel történtek.

Magfizikai megfontolásokból meg akartuk határozni a ^{51}V izotóp 320 keV energiájú, és a ^{103}Rh izotóp 295, illetve 357 keV energiájú gerjesztett állapotainak mágneses nyomatékát. Mindkét izotóp a magfizikusok által tüzetesen vizsgált magok közé tartozik, gyakran szerepel különféle modellszámítások illusztratív példaként. Az elméleti modellek használhatóságáról úgy dönthetünk, hogy megnézzük, mennyire egyeznek a gerjesztett állapotokat jellemző különféle mennyiségek (energia, spin, elektromágneses nyomatékok stb.) számolt értékei a kísérletileg meghatározottakkal. A mágneses nyomaték értéke sokkal élesebben változhat a hullámfüggvény kis meg-

változtatásakor mint pl. az állapot energiája, ezért a mágneses nyomaték kiszámítása jóval érzékenyebb próbája egy elméleti modellnek [4]. Méréstechnikai eredetű nehézségek miatt azonban csak a gerjesztett állapotok töredékének ismert a mágneses nyomatéka, ezért minden új adat nagyon fontos.

Az általunk vizsgált állapotok élettartama 10^{-10} sec nagyságrendű, ezért belső mágneses teret kellett a méréshez használnunk. A belső tér felléptét oly módon értük el, hogy vas-vanádium, illetve vas-ródiom ötvözeteket készítettünk, melyek bizonyos koncentrációtartományban ferromágnesesek. A különböző összetételű ötvözeteken végzett szögelfordulás-mérések összehasonlítása viszont lehetővé teszi, hogy meghatározzuk, hogyan függ a „szennyező” atomok helyén ható hiperfinom tér a szennyező atomok koncentrációjától, és ezzel hasznos szilárdtestfizikai információkhoz jutunk.

2. A vizsgált problémák előzményei

Amint azt már a bevezetésben megjegyeztük, a dolgozat tárgyát képező mérések kettős — magfizikai és szilárdtestfizikai — célkitűzéssel történtek. Elsődleges feladatnak a magfizikai problémák megoldását, azaz a ^{51}V mag 320 keV és a ^{103}Rh 295 keV, illetve 357 keV energiájú gerjesztett állapotai mágneses nyomatékának megmérést tekintettük. Belső mágneses tereket használó mérési módszerünk következtében azonban számos olyan problémával találtuk magunkat szembe, melyek megoldása a mágneses nyomatékok megmérést elősegítő szerepükön túlmenően tisztán szilárdtestfizikai jelentőségű eredményeket is hoztak. Ebben a fejezetben összefoglaljuk azokat az elméleti szempontokat és azokat a korábbi mérési eredményeket, melyek a vizsgálni kívánt magállapotok választását indokolták.

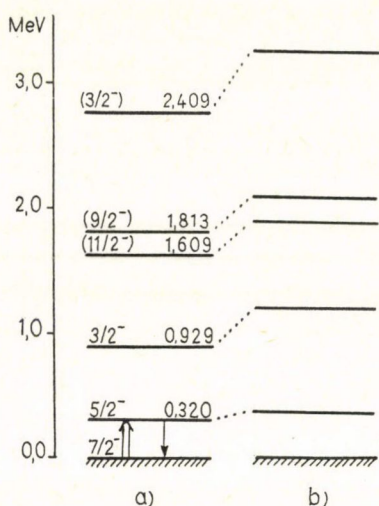
2.1. A vanádium probléma

A ^{51}V mag 23 protont és 28 neutron tartalmazó páratlan-páros mag. A 28 mágikus szám, a héjmodell-leírás szerint a neutronhéj zárt, az $1f_{7/2}$ héj telt be éppen, míg a már betöltött $1d_{3/2}$ héjon kívül az $1f_{7/2}$ héjban három proton maradt.

A ^{51}V mag alacsonyan fekvő nívóit az 1a. ábrán láthatjuk. Az elméleti számítások első feladatuknak általában a gerjesztési spektrum valóságghú leírását tekintik. A kísérletileg meghatározott nívósémát azonban gyakran alapfeltevéseikben lényegesen különböző elméleti modellek is magyarázni tudják hasonló pontossággal, az elektromágneses átmeneti valószínűségekre és az elektromágneses momentumokra ugyanakkor egészen eltérő értékeket adhatnak. A mágneses momentum operátora például, lévén egyrészecske vektor operátor, nagyon érzékeny a mag hullámfüggvények impulzusmomentum tisztaságára [5].

Az irodalomban számos próbálkozás történt a ^{51}V mag szerkezetének és elektromágneses sajátságainak leírására.

A mágneses nyomaték értékére legegyszerűbben az extrém egyrészecske modell segítségével adhatunk becslést. E modell szerint a zárt héjakon kívül levő három proton közül kettő párt alkot és a zárt héjakkal együtt csak a megmaradt egy proton által érzett potenciál kialakításában vesz részt. Az alapállapot spinjéért és mágneses nyomatékáért csak a páratlan proton felelős. Az alapállapot spinje, megfelelően a



1. ábra. A ^{51}V mag alacsonyán fekvő
nívói (a, kísérleti energiák; b, a $(7/2)^3$
konfiguráció alapján számoltak [6])

fenti elképzelésnek, valóban $7/2$. A mágneses nyomatékokat az ún. Schmidt-képlet szolgáltatja [6]:

$$\mu_{J=l+\frac{1}{2}} = l g_p^{(l)} + \frac{1}{2} g_p^{(s)}.$$

A képletben $l, g_p^{(l)}, g_p^{(s)}$ rendre a páratlan proton pályaimpulzusnyomatékát, pálya, ill. spin g -faktorát jelöli. A számértékeket, $l=3, g_p^{(l)}=1$ és $g_p^{(s)}=5,586$, behelyettesítve

$$\mu_{7/2} = g_{7/2} \cdot \frac{7}{2} = 5,793,$$

adódik.

A számunkra érdekes első gerjesztett nívót már nem lehet ezzel a modellel értelmezni.

Sokkal sikeresebb az a leírás, mely a zárt héjakat alkotó első húsz protont, mint semleges törzset veszi figyelembe, a fennmaradt három protont ekvivalens részecskeként kezeli. A legegyszerűbb feltevés az, hogy ez a három proton $(7/2)^3$ konfigurációt alkot, a különböző lehet-

séges alacsony energiájú állapotok pedig oly módon jönnek létre, hogy a három részecske impulzusmomentuma különbözőképpen adódik össze eredő J -vé. A Pauli-elvet is figyelembe véve $3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$ és $15/2$ eredő impulzusmomentumú állapotok lehetségesek, melyek a gerjesztési spektrumban mind megtalálhatók, és igen figyelemre méltó, hogy $13/2$ és $1/2$ spinű állapot viszont nem fordul elő.

Tiszta $(7/2)^3$ konfiguráció esetén lényeges megállapításokat tehetünk a mag szerkezetére vonatkozóan anélkül, hogy a nukleonok közötti kölcsönhatás alakjáról bármit is feltennénk, csupán azt kell kikötnünk, hogy a kölcsönhatást kétestest-erők okozzák. Bebizonyítható ugyanis [6], hogy tetszőleges tiszta $(j)^n$ konfiguráció esetén az illető mag energiakülönbségei kifejezhetők a $(j)^2$ konfigurációjú mag energiakülönbségei segítségével. A mi esetünkben ez azt jelenti, hogy a $(7/2)^3$ konfigurációjú ^{51}V mag alacsonyán fekvő gerjesztett állapotainak energiája kifejezhető a $(7/2)^2$ konfigurációjú ^{50}Ti mag gerjesztett állapotai segítségével. Mivel a Pauli elv a ^{50}Ti mag számára 0, 2, 4 és 6 eredő spinű állapotokat enged meg a $(7/2)^2$ konfigurációban, a ^{51}V öt gerjesztett állapotának energiája csupán három energiakülönbség segítségével megadható. Ezeket az energia-különbségeket ahelyett, hogy valamilyen kölcsönhatás feltevésével számítanánk, legegyszerűbben a ^{50}Ti mért energia spektrumából vehetjük. Az így számított nívósémát az 1b. ábra mutatja. A kísérleti és a mért nívórendszer mind az állapotok sorrendjét, mind pedig az energiaértékeket illetően igen jól egyezik egymással.

Az elektromágneses átmenetekre és a mágneses nyomatékok értékeire is fontos megállapítások tehetők a $(j)^n$ konfiguráció feltételezésével. A mágneses nyomaték kiszámításához a

$$\langle j^n JM | \sum_i \hat{\mu}(i) | j^n JM \rangle$$

mátrix elemeket kell kiértékelnünk, ahol $\hat{\mu}(i)$ az i -edik részecske mágneses nyomaték operátora, $|j^n JM\rangle$ pedig a $(j)^n$ konfiguráció J eredő spinű M vetületű állapota. A mágneses nyomaték várható értéke könnyebben kiszámítható az ún. m -sémában, amikor a konfiguráció minden tagja impulzusmomentumának vetületét használjuk az állapot azonosításához, azaz a $|jm_1, jm_2, \dots, jm_n\rangle$ függvényekkel számolunk [6]. Mivel $\hat{\mu}(i)$ egyrészecske vektoroperátor, a Wigner—Eckardt tétel értelmében mátrix eleme arányos az állapot impulzusmomentumának mátrix elemével. Az arányossági tényezőt nevezik g -faktornak, mely m -től és m' -től független:

$$\langle jm|\hat{\mu}|jm'\rangle = g_{ij}\langle jm|\mathbf{j}|jm'\rangle,$$

azaz a használt modellben a konfigurációt alkotó összes azonos részecskére ugyanaz. Írhatjuk tehát, hogy

$$\begin{aligned} \langle jm_1, jm_2, \dots, jm_n | \sum_i \hat{\mu}(i) | jm'_1, jm'_2, \dots, jm'_n \rangle = \\ = g_{ij} \langle jm_1, \dots, jm_n | \sum_i \mathbf{j}(i) | jm'_1, \dots, jm'_n \rangle. \end{aligned}$$

De mivel $\sum_i \mathbf{j}(i) = \mathbf{J}$, visszatérve az eredeti függvényrendszerre az alábbi eredményt kapjuk:

$$\langle j^n JM | \sum_i \hat{\mu}(i) | j^n JM \rangle = g_{ij} \langle j^n JM | \mathbf{J} | j^n JM \rangle.$$

Ezek az egyenletek vektoregyenletek, mágneses nyomatékon az operátor z komponensének a maximális $M=J$ vetületű állapotban képzett várható értékét szokás definiációszerűen érteni, melynek értéke a fenti egyenlet alapján:

$$\mu(j^n, J) = g_{ij} J.$$

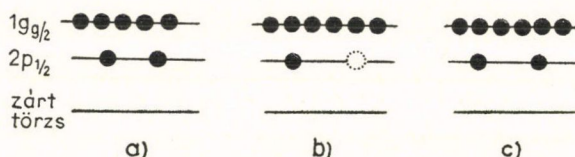
Megállapíthatjuk, hogy egy $(j)^n$ konfigurációjú állapot mágneses nyomatéka arányos a teljes spinnel, az arányossági tényező pedig ugyanaz a konfiguráció összes lehetséges állapotára. Ez azt jelenti, hogy a ^{51}V alap és első négy gerjesztett állapotának ugyanakkora g -faktora kell, hogy legyen! Az alapállapot mágneses nyomatékát *Lindgren* mérte meg [7], a g -faktorra 1,4708 (4) értéket kapott. A gerjesztett állapotok közül csak a 320 keV energiájú első gerjesztett állapotra történt mérés, *Krause* rezonanciafluoreszcencia módszerrel $g=1,69$ (29) kapott eredményül [8]. Ez az adat túlságosan pontatlan ahhoz, hogy határozott következtetést vonjunk le belőle, éppen ezért határoztuk el, hogy megpróbáljuk más módszerrel pontosabban meghatározni az első gerjesztett állapot g -faktorát.

Számos mérésből ismeretes, hogy néhány atomszázalék vanádiumtartalmú Fe—V ötvözetben a vanádium magokra ~ -9 T nagyságú belső mágneses tér hat [9]. A vizsgálni kívánt állapot élettartama $\sim 10^{-10}$ sec, a g -faktor értéke, mint láttuk, 1 körüli érték, a bevezetésben említett szögelfordulásra így a $\sim 0,05$ rad értéket kapjuk, ami jól mérhető nagyságú. Kézenfekvőnek látszik, hogy híg Fe—V ötvözetben gerjesszük a ^{51}V magokat és a belső tér okozta perturbáció segítségével határozzuk meg a mágneses nyomatékot. Nyilvánvaló, hogy minél nagyobb az ötvözet vanádium tartalma, annál könnyebb jó statisztikai pontosságot elérni. *Koi és munkatársai* [9] azonban csak 1 % vanádium tartalmú ötvözetben mérték meg a belső tér értékét nagy pontossággal. Kérdéses, hogy a vanádium koncentráció növelése mennyire befolyásolja a belső tér értékét. Vajon nem rontja-e le a mágneses tér esetleges gyors csökke-

nése a γ -sugárzás hozam növekedés okozta előnyt? Ezen a számunkra lényeges gyakorlati kérdésen túlmenően a belső tér koncentrációfüggése szilárdtestfizikai szempontból is igen érdekes probléma. A koncentrációfüggés alakjából ugyanis következtetéseket lehet levonni a vanádium atomok lokalizált mágneses nyomatékának koncentrációfüggésével kapcsolatban. Éppen ezért végeztünk méréseket széles vanádium koncentráció tartományban.

2.2. A ródium probléma

A ^{103}Rh mag 45 protonot és 58 neutron tartalmazó páratlan-páros mag. A héjmodell szerint a neutronok a $2d_{5/2}$ héjjal bezárólag minden héjat teljesen betöltönek, míg az $1g_{7/2}$ héjon két neutron foglal helyet. A protonok közül az első 38 az $f_{5/2}$ héjig minden állapotot betölt, a megmaradt 7 proton legvalószínűbben a $2p_{1/2}$ és az $1g_{9/2}$ héjakon oszolhat meg. Ha a héjak mechanikusan töltődnek az energia szerinti sorrendjük alapján, akkor a 2a. ábrán látható $(2p_{1/2})^2(1g_{9/2})^5$ konfiguráció valósulna



2. ábra. a, b, a ^{103}Rh mag külső hét protonjának elhelyezkedési lehetőségei; c, a ^{104}Pd valószínű alapállapotú konfigurációja

meg. Az extrém egyrészecske modell ekkor $9/2^+$ spint és $+6,793\mu_N$ mágneses nyomatékot adna a mag alapállapotára. Ezzel szemben a mért alapállapotú spin és paritás $1/2^-$, a mágneses nyomaték pedig $-0,088\mu_N$ [7]. A $1/2^-$ spin-paritás arra utal, hogy a páratlan proton ahelyett, hogy az $1g_{9/2}$ állapotot foglalná el, a $2p_{1/2}$ héjon helyezkedik el, azaz az alapállapot konfigurációja nagy valószínűséggel a 2b. ábrán látható $(2p_{1/2})^{-1}(1g_{9/2})^6$ konfiguráció. Ha a Schmidt képlet segítségével erre a konfigurációra is kiszámítjuk a mágneses nyomatékot, eredményül $-0,264$ magmagnetont kapunk, amely, ha számszerint nem is egyezik a kísérleti értékkel, legalább az előjele jó. A héjaknak ez az anomális sorrendben való töltődése a párkölcsönhatás segítségével magyarázható. A rövid hatótávolságú magerők vonzó hatásukat effektívebben tudják kifejteni, ha a magas impulzusmomentumú állapotok párosan vannak betöltve, és ez az energianyereség nagyobb lehet, mint az a veszteség, mely a magasabb energiájú héjra történő „átugrásból” ered.

A páratlan tömegű magok alapvető sajátosságainak magyarázatára *de Shalit* az ún. „gyenge csatolás törzsgerjesztéses modellt” javasolta [10]. A modell a nukleonokat két részre osztja, és pedig a páratlan részecskére és a megmaradt páros-páros törzsre. A páros-páros törzs tulajdonságairól azt tételezzük fel, hogy nagyon hasonlóak, ha nem azonosak a szomszédos páros-páros magok tulajdonságaival. A 2c. ábra a ^{104}Pd valószínű alapállapotú konfigurációját mutatja. Láthatjuk, hogy a ^{103}Rh alapállapota úgy képzelhető el, hogy a ^{104}Pd törzshöz egy $2p_{1/2}$ lyukat csatolunk. Ha egy ilyen páratlan tömegű magot gerjeszteni akarunk, a gerjesztésre két mód kínálkozik. Az egyik lehetőség az, hogy a törzset változatlanul hagyva a páratlan részecskét egy

magasabb energiájú egyrészecske nívóra emeljük, míg a másik mód a változatlanul hagyott részecskét a törzs gerjesztett állapotához csatolja. Ez a második gerjesztési mód főleg akkor valószínű, ha a törzs gerjesztéséhez szükséges energia lényegesen kisebb, mint amekkora energia a másik egyrészecske állapot eléréséhez szükséges. Ha a gerjesztett törzs impulzusnyomatéka J_c , a j impulzusnyomatékú páratlan részecske csatolódása révén $|j - J_c| \leq J \leq |j + J_c|$ spinű állapotok jöhetnek létre, melyek kölcsönhatás hiányában energia szerint elfajultak. A törzs és a részecske közötti gyenge csatolás azonban feloldja ezt a degenerációt és úgynevezett törzsmultiplettet hoz létre. Ha a részecske spinje $1/2$, mint a ^{103}Rh mag esetében is, úgy ez a multiplett dublettre egyszerűsödik. Mivel a páros-páros törzs legalacsonyabb gerjesztési állapota általában 2^+ spinű, a törzsdublett két tagja $3/2^-$, ill. $5/2^-$ spinparitású kell, hogy legyen. Az alapállapot, ill. a dublett két tagja rendre tehát a következő állapotfüggvényekkel jellemezhető:

$$\left| 0p_{1/2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 2p_{1/2} \frac{3}{2} \right\rangle \text{ és } \left| 2p_{1/2} \frac{5}{2} \right\rangle.$$

A ^{103}Rh mag alacsonyan fekvő gerjesztett állapotait a 3. ábra mutatja. Láthatjuk, hogy a 295 keV, ill. 357 keV energiájú állapot várhatóan ilyen törzsdublett két tagja. (A pozitív paritású állapotok az alapállapottól lényegesen különböző konfigurációjú állapotok kell, hogy legyenek, hiszen pozitív paritás csak úgy jöhet létre, ha a g héjon lesz páratlan számú proton.)

Ez a modell igen egyszerű és kísérletileg jól ellenőrizhető összefüggéseket szolgáltat a mag elektromágneses sajátságaira. Nevezetesen a mágneses nyomatékok additivitását felhasználva a J spinű gerjesztett állapot g -faktorára az alábbi összefüggést kapjuk [5]:

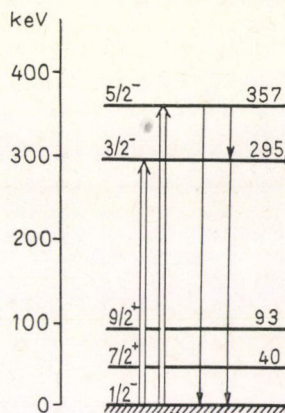
$$g_J = \frac{1}{2} (g_c + g_j) + \frac{1}{2} (g_c - g_j) \frac{J_c(J_c + 1) - j(j + 1)}{J(J + 1)}.$$

A képletben g_c -vel a törzs, g_j -vel a részecske g -faktorát jelöltük. Az általunk vizsgált speciális esetben, ahol egy $1/2$ spinű részecskét csatolunk a 2^+ -os törzshöz, a képlet az alábbi g -faktor értékeket szolgáltatja:

$$g_{3/2} = \frac{6}{5} g_c - \frac{1}{5} g_j; \quad g_{5/2} = \frac{4}{5} g_c + \frac{1}{5} g_j.$$

A két gerjesztett állapot mágneses nyomatékának megmérésevel tehát ellenőrizhetjük a modell alkalmazhatóságát.

Ezen két gerjesztett állapot mágneses nyomatékát először munkacsoportunk mérte meg [11] PADCE módszerrel. A mérésekből nem sikerült g -faktor értékeket meghatározni. A kísérleti adatok konzisztens értelmezéséhez tranziens mágneses tér felépítést kellett feltételeznünk, annak ellenére, hogy az általunk használt alacsony bombázó energiáknál az addigi kísérleti álláspont szerint a tranziens tereknek nem



3. ábra. A ^{103}Rh mag alacsonyan fekvő nívói

lehetett jelentős szerepe [12]. Későbbi vizsgálatokból kiderült, hogy egyrészt a mérés kiértékelésénél a céltárgyat mágnesező kis elektromágnes nyalábra gyakorolt eltérítő hatását (beam bending) nem vettük kellőképpen figyelembe, másrészt hibás belső mágneses tér értéket használtunk. A mérést ugyanis a minél nagyobb γ -hozam érdekében 48,5 at %-os Fe—Rh ötvözzel végeztük, melyben *B. Dreyfus* és *munkatársai* —13,0(4) T belső tér értéket határoztak meg [13], szemben a híg ötvözetekben talált —54 T belső térrel [14]. Későbbi pontos NMR mérések azonban kimutatták, hogy *Dreyfus* és *munkatársai* mérése valószínűleg hibás volt, a belső tér értéke, bár függ a Rh koncentrációtól, nem csökken le ilyen nagy mértékben növekvő Rh koncentrációknál [15].

Éppen az anomális tranziens mágneses tér feltételezése készítette indiai fizikusok egy csoportját ellenőrző mérés elvégzésére [16]. Ők 5 at% Fe—Rh ötvözetet bombáztak 5 MeV energiájú α -részekkel. Eredményül azt kapták, hogy nagy valószínűséggel nincs tranziens mágneses tér és a mért g -faktor értékek aránya összefér a törzsgerjesztéses modell segítségével számolt aránnyal. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy az előbb vázolt törzsgerjesztéses modell nem az arányra, hanem külön-külön a g -faktorok nagyságára szolgáltat közvetlen összefüggést, így az arányok egyezése nem meggyőző érv a modell helyessége mellett.

Ezzel a méréssel közel egyidőben még három csoport vizsgálta a ^{103}Rh ezen két állapotának mágneses nyomatékát. *Roney* és *munkatársai* ion implantációs perturbált szögkorrelációs technikával (IMPAC) végeztek méréseket [17]. Az $5/2^-$ állapot g -faktorára 0,55(1) értéket kaptak, míg a $3/2^-$ állapot g -faktora hibán belül zérusnak adódott. A törzsgerjesztéses modell viszont éppen a $3/2^-$ állapotra jóval nagyobb g -faktort. A null effektus oka a [16] alatti dolgozat szerint valószínűleg az volt, hogy az esetükben fellépő tranziens tér okozta elfordulás éppen kompenzálta a mérni kívánt elfordulást.

A hiperfinom kölcsönhatásokkal foglalkozó rehovothi konferencián *Sprouse* összefoglaló előadást tartott gázba lökődő magokat ért hiperfinom kölcsönhatásról [18]. Előadását többek között a ^{103}Rh szóbanforgó két állapotának g -faktor mérésével illusztrálta. Mérései $g_{5/2}=0,45(10)$ és $g_{3/2}=0,60(15)$ értékeket adtak eredményül.

Végül a kanadai *McMaster* egyetemen dolgozó kutatók különböző energiájú α -nyalábbal gerjesztették a ródiium szóbanforgó két nívóját és a szögelfordulások segítségével a tranziens tér visszalökési energiafüggését kívánták tanulmányozni [19]. Méréseik kiértékeléséhez $g_{3/2}=1,2$ és $g_{5/2}=0,6$ értékeket használtak, melyeket *Sprouse* magánközléséből vettek. A 48,5 at% ródiium tartalmú vas-ródiium ötvözzel elvégzett mérések szerint 7 MeV körüli α -bombázó energiánál éles változás történik mind a tranziens, mind a sztatikus tér értékében. Ugyanakkor anomális hőmérsékletfüggést is tapasztaltak, melyet kielégítően nem tudtak magyarázni. A viszonylag önkényesen választott g -faktor értékek mellett a mérés megbízhatóságát csökkenti az az eredményük is, hogy az általuk kapott sztatikus tér érték a fent már említett, később hibásnak bizonyult fajhőmérési belső tér értékkel egyezett meg.

Az összes felsorolt mérés közös hiányossággal is rendelkezik. Egyik esetben sem történik említés a kérdéses két gerjesztett állapotot összekötő 62 keV energiájú γ -sugárzás esetleges zavaró hatásáról. A ^{195}Pt izotóp hasonló szerkezetű dublettjén elvégzett méréseink azt mutatták, hogy egy ilyen közbenső átmenet pontos figyelembevétele lényeges korrekciót jelenthet, azaz minden további nélkül nem tekinthetünk el tőle [20], [21].

Éppen a fenti hiányosságok és a korábbi mérési eredmények összeférhetetlensége miatt határoztuk el, hogy PADCE módszerünk segítségével a lehető legpontosabban megmérjük a ^{103}Rh kérdéses két g -faktorát, valamint a vas-ródium ötvözetekben a ródium magok helyén fellépő belső mágneses tér ötvözesi aránytól való függését.

3. A mérési módszer elvei

3.1. A Coulomb-gerjesztés hatáskeresztmetszete

Miután ebben a dolgozatban gerjesztett állapotok mágneses nyomatékának mérésével foglalkozunk, a mérési feladat első lépése a gerjesztett állapot létrehozása. Az atommagok gerjesztésére több módszer kínálkozik, pl. neutronokkal vagy töltött részecskékkel létrehozott magreakciók. Ebben a munkában az úgynevezett Coulomb-gerjesztést alkalmaztuk. Coulomb-gerjesztésről akkor beszélünk, ha a magokat olyan energiájú pozitív ionokkal bombázzuk, hogy a lövedék és a targetmag a Coulomb tasztítás miatt elegendően távol marad egymástól ahhoz, hogy a rövid hatótávolságú magerők ne tudjanak működésbe lépni. A lövedék viszont időben változó elektromágneses teret kelt a targetmag helyén és az energiát abszorbeálva a tértől gerjesztett állapotba kerülhet. Mivel egy mozgó töltés mágneses és elektromos terének hányadosa v/c -vel arányos és a gerjesztési hatáskeresztmetszetben ez a faktor négyzetesen szerepel, a mágneses gerjesztések elhanyagolhatók az elektromos gerjesztések mellett. A multipólusok szerinti sorfejtés segítségével elvégzett számítások az elektromos gerjesztésekre az alábbi teljes hatáskeresztmetszetet adják [1]:

$$\sigma = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sigma_{E\lambda} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left(\frac{Z_1 e}{\hbar v_i} \right)^2 a^{-2\lambda+2} B(E\lambda, I_i \rightarrow I_f) f_{E\lambda}(\eta_i, \xi).$$

Az E index a gerjesztés elektromos jellegére utal, a többi betű jelentése pedig a következő: Z_1 a lövedék rendszáma, v_i a kezdeti sebessége, e az elemi töltés, a azon legkisebb távolság fele, amennyire a lövedék és a célmag megközelítheti egymást. A $B(E\lambda, I_i \rightarrow I_f)$ függvény az úgynevezett redukált átmeneti valószínűség, pusztán a mag sajátosságaitól függő mennyiség. Pontosabban: annak az időegységre eső valószínűsége, hogy egy mag I_f impulzusmomentumú gerjesztett állapotból λ multipolaritású, $\hbar\omega$ energiájú elektromos γ -sugárzás kibocsájtásával I_i impulzusmomentumú végállapotba menjen át, a következő [22]:

$$P = \frac{8\pi(\lambda+1)}{\lambda[(2\lambda+1)!!]^2} \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^{2\lambda+1} \frac{2I_f+1}{2I_i+1} B(E\lambda, I_i \rightarrow I_f).$$

Az $f_{E\lambda}(\eta_i, \xi)$ függvény a szóródó lövedék adatait is tartalmazó integrál kifejezés, az úgynevezett gerjesztési függvény [1], argumentumai pedig az alábbi mennyiségeket jelölik:

$$\eta_i = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_i}, \quad \xi = \eta_f - \eta_i = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \left(\frac{1}{v_f} - \frac{1}{v_i} \right).$$

A képletekben Z_2 a targetmag rendszáma, v_i és v_f pedig a bombázó részecske kezdeti, ill. végsebessége. A gerjesztési függvény argumentumainak ilyen választását a

probléma úgynevezett félklasszikus tárgyalásával való analógia fenntartása indokolja [1].

A hatáskeresztmetszettel kapcsolatban a következőket érdemes megjegyeznünk. A λ szerinti sorfejtés a kísérletileg talált $B(E2)$ mennyiségek nagyságrendje és az $f_{E\lambda}$ függvény λ szerinti viselkedése miatt gyakorlatilag egyetlen tagra, a $\lambda=2$ kvadrupol gerjesztésre redukálódik. Mint azt már a $B(E2)$ mennyiség definíciójánál említettük, a redukált átmeneti valószínűség arányos az elektromágneses bomlás átmeneti valószínűségével, azaz fordítva arányos a gerjesztett állapot élettartamával. A jól Coulomb-gerjeszthető állapotokat tehát a rövid élettartamú állapotok között kell keresnünk. Az $f_{E\lambda}$ gerjesztési függvény a bombázó energiának sima függvénye, ezért a Coulomb-gerjesztés nem rezonancia folyamat, így nem érzékeny a gyorsított részecskék kis energia ingadozásaira, azaz a gyorsítóberendezés stabilitására.

3.2. A Coulomb-gerjesztést követő γ -sugárzás szögeloszlása

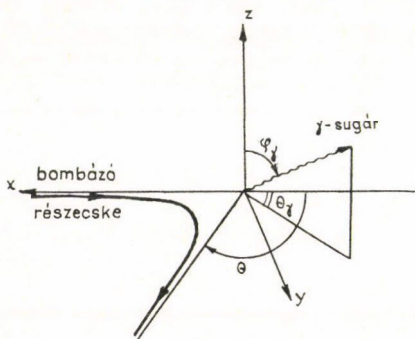
A Coulomb-gerjesztett állapotok elbomlásakor keletkezett γ -sugárzás a bombázó nyaláb irányához képest általában anizotrop szögeloszlást mutat.

A szögeloszlás probléma legáltalánosabban három kitüntetett irányt tartalmaz, a bombázó nyaláb, a szórt nyaláb, és a kibocsájtott γ -sugár irányát. Kérdezhetjük, mi a valószínűsége annak, hogy a bombázó nyaláb θ szöggel térüljön el, a γ -kvantum pedig a φ_γ és θ_γ szögekkel jellemzett irányba bocsájtódjék ki. A szóbanforgó szögek jelentését a 4. ábra mutatja.

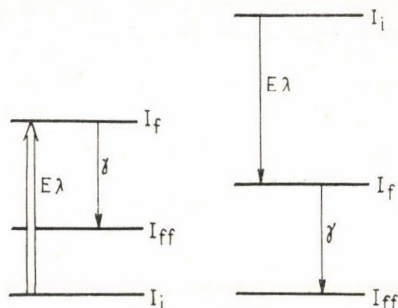
Mi nem tárgyaljuk ezt az általános esetet, mérési elrendezésünk egyszerűsítésket tesz lehetővé. Egyrészt a γ -detektort úgy helyeztük el, hogy $\varphi_\gamma=90^\circ$ legyen, másrészt nem törődünk a szóródott részecske sorsával, azaz a θ szög szerint integrált szögeloszlást vizsgáljuk. A feladat tehát: mi a valószínűsége annak, hogy a bejövő nyalábhoz képest θ_γ szögben γ -kvantum emittálódjék? (A továbbiakban a γ indexet, más szög nem lévén, el is hagyjuk.)

Már a gerjesztés hatáskeresztmetszetének vizsgálatakor láttuk, hogy szoros kapcsolat fedezhető fel a Coulomb-gerjesztés és a mag elektromágneses elbomlása között. Ez a kapcsolat a szögeloszlás meghatározásánál is segítséget jelent.

Kimutatható ugyanis, hogy a szögeloszlás szempontjából a Coulomb-gerjesztés és a gerjesztett állapot γ -sugárzás segítségével történő elbomlása egy ekvivalens $\gamma-\gamma$ kaszkáddal helyettesíthető [1]. (Lásd az 5. ábrát!)



4. ábra. A szögeloszlás számításakor fellépő szögek szemléltetése



5. ábra. A Coulomb-gerjesztés és az ekvivalens $\gamma-\gamma$ kaszkád sémája

Ez utóbbi kaszkád szögkorrelációs függvénye, amely annak a relatív valószínűségét adja meg, hogy a második γ -kvantum iránya θ szöget zárjon be az első γ -kvantum irányával, az alábbi alakba írható:

$$W_{\gamma\gamma}(\theta) = 1 + \sum_{k=2}^{k_{\max}} A_k P_k(\cos \theta), \quad k \text{ páros},$$

ahol a P_k függvények a k -ad rendű Legendre-polinomok, az A_k mennyiségek pedig a kaszkád folyamatban szereplő spinek és keveredési paraméterektől függő úgynevezett γ - γ szögkorrelációs együtthatók, melyek számszerű értékei táblázatokban találhatók. Az összegzés felső határát jelölő k_{\max} pedig nem lehet nagyobb, mint λ , I_f és γ közül a legkisebb kétszerese (γ itt a γ -sugárzás multipolaritását jelöli).

A megfelelő Coulomb-gerjesztést követő γ -sugárzás szögeloszlásfüggvényét polarizálatlan target esetében pedig a következő képlet írja le:

$$W_{C.G.} = 1 + \sum_{k=2}^{k_{\max}} a_k(\eta_i, \xi) A_k P_k(\cos \theta), \quad k \text{ páros}.$$

A különbség tehát mindössze annyi, hogy minden egyes szögkorrelációs együtthatót meg kell szorozni a megfelelő, a Coulomb-gerjesztésre jellemző $a_k(\eta_i, \xi)$ részecskeparaméterrel. A helyes jelölés tulajdonképpen az $a_k^{E,\lambda}$ alak lenne, de mivel gyakorlatilag csak $E2$ gerjesztés fordul elő, így ezt az indexet elhagytuk. Ezeket a részecskeparamétereket az $f_{E\lambda}$ gerjesztési függvényekhez hasonlóan lehet számítani, értékeik, melyek táblázatokban találhatók, jól leírják a kísérleti tapasztalatokat.

Miután a k_{\max} értékét megszabó impulzusmomentum értékek között a gerjesztés $\lambda=2$ multipolaritása mindig előfordul, ez az érték biztosítja, hogy a többi impulzusmomentum értékétől függetlenül $k>4$ indexű tagok ne fordulhassanak elő a szögeloszlásban. A részecskeparaméterek fellépte általában tovább csökkenti a tagok számát, a_4 rendszerint zérushoz közeli értéke miatt legtöbbször elegendő csak a k szerinti összeg első tagját figyelembe venni, azaz a szögeloszlásfüggvény az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$W_{C.G.} = 1 + a_2 A_2 P_2(\cos \theta).$$

A számítások azt mutatják, hogy a_2 értéke a bombázó energia növelésével csökken, azaz a bombázó energia rontja a szögeloszlás anizotrópiáját. Ez azt jelenti, hogy bár növekvő bombázó energiánál nő a gerjesztési hatáskeresztmetszet és így a γ -hozam is, az anizotrópia csökkenése miatt nem célszerű a bombázó energiát egy bizonyos határon túl növelni. Méréseinkben 2,5 MeV energiájú protonokat használtunk, ez a bombázó energia jó kompromisszumnak bizonyult a hozam és az anizotrópia szempontjából. Ennél a protonenergiánál pl. a ^{51}V 320 keV-es nívójára a_2 értéke $\sim 0,70$, míg a_4 értéke $\sim 0,02$.

3.3. A mágneses tér hatása a szögeloszlásra

Az előzőekben felírt szögeloszlásfüggvény csak akkor érvényes, ha a gerjesztett állapotban levő magot semmiféle zavaró hatás, perturbáció nem éri. Ha azonban valamilyen kölcsönhatás révén változás áll be a gerjesztett mag állapotában, ez módosíthatja a szögeloszlást, ebben az esetben perturbált szögeloszlásról beszélünk.

Egy kristályba beépített magot számos perturbáció érhet, ezen perturbációk lehetnek időben állandó jellegű kölcsönhatások, de lehetnek az idővel gyorsan változó hatások is. Például a rácsrezgések, belső elektromos és mágneses terek befolyásolhatják a mag állapotát, és ezen keresztül a szögeloszlásképet. Az irodalomban a legkülönbözőbb perturbációk esetére megtalálhatók a perturbált szögkorrelációkat, ill. szögeloszlásokat leíró összefüggések [2]. Ha a gerjesztett magállapot élettartama elég kicsiny ($< 10^{-8}$ s) és a magot magában foglaló kristály köbös szimmetriájú, csak a mágneses tér az, amely számottevően perturbálhatja a szögeloszlást. Számunkra az az eset érdekes, amikor a bombázó nyaláb és a γ -sugárzást észlelő detektor által meghatározott síkra merőleges irányú, időben állandó B mágneses tér hat, mérésünkben ugyanis ezt a helyzetet próbáltuk megvalósítani.

A számítások szerint ebben az esetben a szögeloszlásképe a mágneses tér iránya körül $\omega = \frac{\mu B}{\hbar I}$ körfrekvenciával körbe forog, azaz a szögeloszlásfüggvény a gerjesztett állapot létrejöttétől t idővel a következő alakú:

$$W(\theta, \pm B, t) = 1 \sum_{k=2}^{k_{\max}} a_k A_k P_k(\cos(\theta \mp \omega t)).$$

A pozitív, ill. negatív előjel ellentétes irányú mágneses teret jelöl. A körfrekvencia kifejezésben μ és I a gerjesztett állapot mágneses nyomatékát, ill. spinjét jelöli. Ha alkalmas mérőberendezéssel sikerül a szögeloszlásfüggvény fenti időfüggő alakját kimérni, akkor úgynevezett idő differenciális mérésről beszélünk. Igen rövid élettartamú nívók esetén a gerjesztett állapotnak nincs ideje, hogy elbomlása előtt néhány periódust precesszáljon, ezért 10^{-10} s nagyságrendű állapotok esetén az idő differenciális módszer nem alkalmazható. Ha azonban mérési elrendezésünk olyan, hogy a gerjesztés létrejöttétől számított akármilyen hosszú idő múlva is lehetségessé teszi a γ -kvantumok detektálását, úgy a bomlásgörbére átlagolt idő integrális szögeloszlásfüggvényt mérhetjük ki [2]:

$$W(\theta, \pm B) = \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} W(\theta, t, \pm B) dt}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} dt} \approx 1 + \sum_{k=2}^{k_{\max}} \frac{a_k A_k}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}} P_k(\cos(\theta \mp \Delta\theta)),$$

ahol τ a gerjesztett állapot közepes élettartama, a szögelfordulás pedig a $\tan \Delta\theta = \omega\tau$ összefüggés segítségével kapcsolatos a precesszió körfrekvenciájával.

A képletből kiolvasható, hogy az integrális esetben a mágneses térnek kettős hatása van. Egyrészt a szögeloszlás a perturbálatlan esethez képest $\Delta\theta$ szöggel elfordul, másrészt az anizotropia nagysága a nevezőben levő négyzetgyökös kifejezés miatt lecsökken (attenuáció lép fel). Kicsiny szögelfordulásnál $\tan \Delta\theta \approx \Delta\theta$ -val közelíthető, azaz a szögelfordulás a körfrekvencia és az élettartam szorzatával egyezik meg:

$$\Delta\theta \approx \omega\tau = \frac{\mu B}{\hbar I} \tau.$$

A méréseink szempontjából alapvetően fontos perturbált szögeloszlásfüggvényt a fent megadottal ekvivalens, de gyakorlatilag kényelmesebb alakra hozhatjuk, ha a

Legendre-polinomok helyett a $\cos k\theta$ függvények szerinti sorfejtést használjuk. Ha tehát a perturbálatlan szögeloszlásfüggvényt

$$W(\theta) = 1 + \sum_{k=2}^{k_{\max}} b_k \cos k\theta$$

alakba írjuk, akkor a perturbált szögeloszlásfüggvény az alábbi általánosan használt formát ölti:

$$W(\theta, \pm B) = 1 + \sum_{k=2}^{k_{\max}} \frac{b_k}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}} \cos k(\theta \mp \Delta\theta).$$

A két sorfejtés együtthatói közötti összefüggés $k_{\max}=4$ esetben a következő:

$$b_2 = \frac{3a_2 A_2 + \frac{5}{4} a_4 A_4}{4 + a_2 A_2 + \frac{9}{16} a_4 A_4}; \quad b_4 = \frac{\frac{35}{16} a_4 A_4}{4 + a_2 A_2 + \frac{9}{16} a_4 A_4}.$$

Mivel egy atommag mágneses nyomatéka párhuzamos az atommag impulzusnyomatékával, szokásos a mágneses nyomatékot magmagneton egységekben mérve az impulzusnyomaték segítségével kifejezni, azaz a

$$\mu = -g \mu_N I$$

kifejezést használni. A negatív előjel konvenció eredménye. A képletben μ_N az ún. magmagneton, értéke $5,05 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}$, a g arányossági tényezőt pedig g -faktornak nevezik. Ha a mágneses nyomaték fenti alakját a szögelfordulás képletébe helyettesítjük a

$$\tan \Delta\theta = \omega\tau = -\frac{g\mu_N B\tau}{\hbar}$$

összefüggést kapjuk.

Ha tehát a szögelfordulást megmérjük, a mérési eredményből és B ismeretében közvetlenül a g -faktort kaphatjuk meg. Éppen ezért a mágneses nyomaték mérés helyett az irodalomban gyakran használatos a g -faktor mérés kifejezés.

3.4. A nem megfigyelt közbenső sugárzás hatása

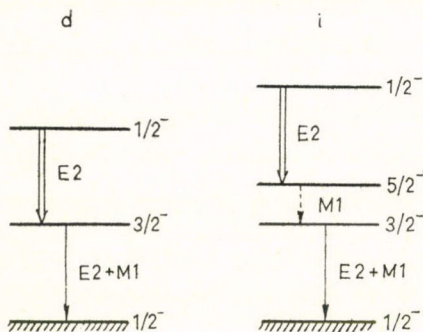
A ^{51}V alacsonyan fekvő gerjesztett állapotait mutató 1a. ábrán láthatjuk, hogy ennél az izotópnál a mérési helyzet teljesen tiszta. Az általunk használt proton energiáknál gyakorlatilag csak az első izomér állapot gerjesztődik és az összes keletkező γ -sugár az alapállapotba történő lebomlást jelzi. A ^{103}Rh izotóp esete már nem ilyen egyszerű. A Coulomb-gerjesztés során a 295 keV, és a 357 keV energiájú állapot egyaránt létrejön. A 295 keV energiájú állapot közvetlenül az alapállapotra bomlik, a 357 keV-es állapot bomlásainak bizonyos hányada azonban az alapállapot helyett a 295 keV energiájú állapotba bomlik és csak onnan tovább az alapállapotba. A mérés során detektált 295 keV energiájú γ -kvantumok tehát „származásuk” szerint két csoportra oszthatók: a 295 keV-es állapot közvetlen Coulomb-gerjesztéséből

származó közvetlen (direkt) γ -kvantumok és a 357 keV energiájú állapot kaszkád bomlásából származó közvetett (indirekt) γ -kvantumok csoportjára. A két fajta sugárzás megkülönböztetésére a továbbiakban a d , ill. az i indexet használjuk. Ha a két sugárzás szögeloszlás-, és perturbált szögeloszlás függvénye megegyezne, úgy a különböző „származásnak” csak a mágneses nyomaték mérése szempontjából lényegtelen elvi jelentősége lenne, a valóságban azonban egyrészt a direkt és indirekt γ -sugarak szögeloszlásfüggvénye különbözik, másrészt a mágneses tér hatására is másként viselkedik a két szögeloszlás-függvény.

Először vizsgáljuk meg a szögeloszlásfüggvényt! Ha α jelöli a közvetlen 295 keV energiájú γ -sugarak relatív hányadát, β pedig a közvetettekét, akkor a mért szögeloszlásfüggvény az alábbi alakba írható:

$$W_m(\theta) = \alpha W_d(\theta) + \beta W_i(\theta) \approx 1 + \alpha \sum_{k=2}^{k_{\max}^d} b_k^d \cos k \theta + \beta \sum_{k=2}^{k_{\max}^i} b_k^i \cos k \theta.$$

Miután az irodalomban található táblázatok általában a Legendre-polinomok szerinti sorfejtés együtthatóit tartalmazzák, a két szögeloszlást összehasonlító számítást ezekre az A_k együtthatókra végezzük el. A direkt és indirekt gerjesztési módnak megfelelő ekvivalens γ -kaszkádokat a 6. ábra mutatja. Az ábrán szereplő impulzusmomentum értékek a ^{103}Rh mag állapotainak tényleges impulzusmomentum értékei. A direkt gerjesztés esete egyszerű kettős korreláció, ahol a kaszkád második tagja kevert ($E2 + M1$) sugárzás. A szögkorreláció az alábbi módon fejezhető ki a Sharp és munkatársai által összeállított táblázat tartalmazta $Z_1(L_i j L'_i j, I_i k)$ együtthatók segítségével, ahol L_i a gammasugárzások multipolaritását, j a közbenső, I_i pedig a kezdeti, illetve végállapot spinjét jelöli, a vesszők



6. ábra. A közvetlen (d) és közvetett (i) bomlások ekvivalens kaszkádjai

az azonos típusú keveredő mennyiségek megkülönböztetésére, az indexek pedig a különböző állapotok, illetve sugárzások megkülönböztetésére szolgálnak [23]:

$$W_d(\theta) = \sum_{k=0}^2 (-1)^{I_1 - I_2} Z_1(L_1 j L'_1 j, I_1 k) [Z_1(L_2 j L'_2 j, I_2 k) + 2\delta Z_1(L_2 j L'_2 j, I_2 k) + \delta^2 Z_1(L'_2 j L'_2 j, I_2 k)],$$

ahol δ^2 az úgynevezett keveredési arány, azaz a $E2$ és $M1$ típusú sugárzás intenzitásának aránya.

Az impulzusmomentumok értéke a szóbanforgó esetben a 6. ábráról leolvasható:

$$I_1 = I_2 = \frac{1}{2}, \quad L_1 = L'_1 = 2, \quad L_2 = 1, \quad L'_2 = 2, \quad j = j' = \frac{3}{2}.$$

A táblázatból kikeresve a megfelelő együtthatókat és behelyettesítve a szögkorreláció képletébe a

$$W_d = 1 + \frac{-1 + 2\sqrt{3}\delta + \delta^2}{4(1 + \delta^2)} P_2(\cos \theta) = 1 + A_2 P_2(\cos \theta)$$

eredményt kapjuk.

Az indirekt gerjesztésű sugárzás esete hármaskorreláció, de mivel a közbelső sugárzással nem törődünk, az úgynevezett nem megfigyelt közbelső sugárzású hármaskorrelációs függvényt kell felírunk [23]:

$$W_i(\theta) = \sum_k (-1)^{I_1+I_2-L_{12}+J_1-J_1'+L_2+L_2'} Z_1(L_1 J_1 L_1' J_1', I_1 k) W(J_1 J_2 J_1' J_2', L_{12} k) *$$

$$* [Z_1(L_2 J_2 L_2 J_2, I_2 k) + 2\delta Z_1(L_2 J_2 L_2' J_2', I_2 k) + \delta^2 Z_1(L_2' J_2' L_2' J_2', I_2 k)].$$

A $W(J_1 J_2 J_1' J_2', L_{12} k)$ Racah-együtthatók a Z_1 együtthatókkal együtt a [23] alatti összeállításban találhatók. Az aktuális impulzusmomentum értékeket szintén a 6. ábrán láthatjuk. A megfelelő együtthatók behelyettesítésével az indirekt sugárzás szögeloszlására a

$$W_i(\theta) = 1 + \frac{8}{10} \frac{-1 + 2\sqrt{3}\delta + \delta^2}{4(1 + \delta^2)} P_2(\cos \theta) = 1 + \frac{4}{5} A_2 P_2(\cos \theta)$$

összefüggést kapjuk. A két szögeloszlást összehasonlítva láthatjuk, hogy az indirekt sugárzás kevésbé anizotrop, mivel a Legendre-polinom együtthatója kisebb. A most felírt szögkorrelációs függvények az ekvivalens $\gamma-\gamma$ kaszkádokra vonatkoznak, ahhoz, hogy a Coulomb-gerjesztést követő γ -sugárzások szögeloszlásfüggvényeit megkapjuk, a szögeloszlásfüggvények együtthatóit még meg kell szorozni a megfelelő részecskeparaméterekkel, azaz a mért szögeloszlást a következő függvény írja le:

$$W_{m,c.g.} = \alpha [1 + a_2^i A_2 P_2(\cos \theta)] + \beta \left[1 + \frac{4}{5} a_2^i A_2 P_2(\cos \theta) \right],$$

ahol a_2^i a 295 keV-es, a_2^i pedig a 357 keV-es állapot gerjesztésére vonatkozó részecskeparaméter.

Ezek után vizsgáljuk meg, hogy a fenti szögeloszlásfüggvény hogyan módosul, ha a magokat mágneses térbe helyezzük. Kvalitatíven rögtön belátható, hogy a direkt és indirekt sugárzás szögeloszlása lényegesen különbözően viselkedik a mágneses tér hatására. A direkt gerjesztéssel létrejött állapot az ω_{295} körfrekvenciával precesszál, ha a 3.3 fejezetben megbeszélt irányú állandó mágneses tér hat rá. (Az alsó index az állapot energiájára utal.) Időintegrális esetben pedig $\arctan \omega_{295} \tau_{295}$ szöggel elfordul a szögeloszlás. Az indirekt sugárzásnak azonban mágneses térben eltöltött „előélete” is van. A gerjesztéskor létrejött 357 keV energiájú állapot már $\arctan \omega_{357} \tau_{357}$ szöggel elfordul a mágneses tér hatására, mire 295 keV-es állapotra bomlik. Az indirekt gerjesztésű 295 keV-es állapotok kiindulási helyzete tehát lényegesen különbözik a direkt gerjesztésűektől. A helyzet megvilágításához tegyük fel, hogy az alsó állapot élettartama olyan rendkívül rövid, hogy a rendelkezésre álló mágneses tér nem képes mérhető elfordulást okozni. A felső állapot viszont legyen olyan élettartamú, mely jól mérhető szögelfordulást enged meg. Ekkor az alsó állapot perturbált szögeloszlásának megmérésénél a direkt és indirekt sugárzás relatív intenzitásától függő nagyságú szögelfordulást mérhetünk, mely szögelfordulás termé-

szetesen a felső állapot mágneses tulajdonságait tükrözi! Közbenső sugárzás lehetősége esetén tehát igen körültekintően kell eljárunk, nehogy hamis következtetéseket vonjunk le.

A kvalitatív várákozást a pontos számítások is igazolják. A hármas γ -kaskádok perturbált szögkorrelációját Bencze és Zimányi vizsgálta, dolgozatukban az általános formula mellett a számunkra érdekes nem megfigyelt közbenső sugárzás esete is megadták az időintegrális perturbált szögeloszlásfüggvényt [24]:

$$W_i(\theta, \pm B) = 1 + \frac{A_2}{\sqrt{1 + (2\omega\tau_{295})^2} \sqrt{1 + (2\omega\tau_{357})^2}} P_2(\cos 2(\theta \mp (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_2))),$$

ahol

$$\tan \Delta\theta_1 = \omega\tau_{295} \quad \text{és} \quad \tan \Delta\theta_2 = \omega\tau_{357}.$$

A képlet az előbbi megfontolásokkal összhangban explicite tartalmazza a 357-keV energiájú állapot szögelfordulását. A méréssel meghatározható perturbált szögeloszlásfüggvény tehát a következő alakba írható:

$$W_{m,C.G.}(\theta, \pm B) = \alpha \left[1 + \frac{a_2^d A_2}{\sqrt{1 + (2\omega\tau_{295})^2}} P_2(\cos(\theta \mp \Delta\theta_1)) \right] + \beta \left[1 + \frac{\frac{4}{5} a_2^i A_2}{\sqrt{(1 + (2\omega\tau_{295})^2)(1 + (2\omega\tau_{357})^2)}} P_2(\cos(\theta \mp (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_2))) \right].$$

3.5. A belső mágneses terek tulajdonságai

A perturbációval kapcsolatos eddigi megfontolásaink szempontjából a perturbációt okozó mágneses tér eredete teljesen közömbös volt. A gyakorlatban viszont igen lényeges feladat a megfelelő nagyságú és irányú mágneses tér előállítása. Már a bevezetésben említettük, hogy elektromágnesek csak bizonyos élettartam tartományig használhatók, rövid élettartamok esetében a mágneses anyagokban fellépő belső mágneses tereket kell felhasználnunk. A mérés megbízható kiértékeléséhez viszont minél alaposabban ismernünk kell ezen belső mágneses terek tulajdonságait és a velük kapcsolatos nehézségeket. Ebben a fejezetben ezekkel a kérdésekkel foglalkozunk.

Egy $\mu = g \cdot I$ mágneses nyomatékú mag mágneses nyomatéka révén kölcsönhat saját és környezete elektronjaival, ezt a kölcsönhatást hiperfinom kölcsönhatásnak nevezzük. A kölcsönhatási energiát $-\mu B_{hf}$ alakba írva, értelmezhetjük a magra ható effektív B_{hf} hiperfinom, vagy belső teret. A hiperfinom tér nagyságának kiszámítása meglehetősen bonyolult feladat. Viszonylag tisztán tárgyalható a szabad ionok és atomok esete. A tiszta fémek már lényegesen bonyolultabbak, mivel ezekben az elektronok egy része nem lokalizált, hanem vezetési sávokat alkot. Elvileg még kevésbé tisztázottak az ötvözetekben fellépő hiperfinom terek, márpedig számunkra ez az utóbbi eset az érdekes. Nagyságrendi viszonyok és a kristályszerkezetből eredő hatások miatt az esetek döntő többségében a mag helyén létrejött hiperfinom térhez a legjelentősebb járulékot a mag helyén sűrűséggel bíró s -elektronok adják. A ferromágneses anyagokban az atomi momentumok kicserélődési kölcsönhatással rendeződnek egy doménen belül, azaz a betöltetlen d -héjak polarizáltak. Az így fellépő

kitüntetett spinirány miatt az ezzel az iránnyal párhuzamos spinű s -elektronok (spinirányukat jelölje felfelé mutató nyíl) radiális hullámfüggvénye sem lesz azonos a lefelé mutató spinűekével, vagyis a mag helyén a betöltött s -héjaknak és sávoknak is lesz eredő spinsűrűsége:

$$\Delta Q(0) = \sum_{n,s} [|\psi_{ns\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{ns\downarrow}(0)|^2].$$

A képletben pl. $\psi_{ns\uparrow}$ az n -dik s -héj, ill. sáv felfelé álló spinű elektronjának hullámfüggvénye. Ez a spinsűrűség a mag helyén Fermi féle kontakt kölcsönhatás segítségével [25] az alábbi mágneses teret kelti:

$$B_{hf} = \frac{8\pi}{3} g\mu_B S \Delta Q(0),$$

ahol g az elektron g faktora ($g=2$), μ_B az ún. Bohr-magneton, S pedig a kérdéses atomnak tulajdonítható teljes spin. A feladat tehát $\Delta Q(0)$ kiszámítása.

A probléma teljes általánosságban messze nem tekinthető megoldottnak. A kísérleti adatokat elég jól leíró félempirikus modellhez juthatunk, ha az s -elektronokat két csoportra osztjuk, a mag körül többé-kevésbé lokalizált törzs elektronokra és a sávszerkezetű delokalizált vezetési elektronokra. Ennek megfelelően a hiperfinom tér is két összetevőből áll, a törzspolarizációs (angol rövidítéssel CP) és a vezetési elektron polarizációs (CEP) járulékból [3]:

$$B_{hf} = B_{CP} + B_{CEP}.$$

A törzspolarizációs járulék a tapasztalat szerint arányosnak vehető a vizsgált atom μ lokalizált momentumával, azaz $B_{CP} = a\mu$. Az arányossági tényező egy-egy átmeneti fém sorozaton belül közel állandó, értéke rendre $5-7 \text{ T}/\mu_B$, $40 \text{ T}/\mu_B$ és $100 \text{ T}/\mu_B$ a 3d, 4d és 5d elemekre [26].

A vezetési-elektron polarizációs járulék viszont az átlagmágnesezettségre jellemző egy atomra eső momentummal vehető arányosnak; $B_{CEP} = b\bar{\mu}$. Összefoglalva tehát, egy AB típusú ötvözetben, ahol az A elem koncentrációja c , az A elem helyén fellépő hiperfinom tér elég jól leírható az alábbi képlettel [27]:

$$B_{hf}^A = a\mu_A + b\bar{\mu},$$

ahol $\bar{\mu} = c\mu_A + (1-c)\mu_B$. A vezetési-elektron polarizációs tag fenti alakja azzal a feltevéssel egyenértékű, hogy a vezetési-elektronok polarizálásában az ötvözet alkotóelemei saját momentumuk arányában vesznek ki részüket.

Az elmúlt évtizedben igen sokféle fajtájú és összetételű ötvözetben mérték meg a hiperfinom tereket, rendszerint magrezonancia-, spin echo-, Mössbauer-, perturbált szögkorrelációs és szögeloszlás módszerrel.

A hiperfinom terekkel kapcsolatos eddigi megfontolásaink olyan esetekre vonatkoztak, amikor a vizsgált atommagok egyensúlyi rácshelyükön foglaltak helyet, ezt a helyzetet a továbbiakban sztatikusnak fogjuk nevezni, ennek megfelelően a sztatikus állapotban levő atommagok helyén ható belső teret B_{st} -vel jelöljük. Az előző összes, a mágneses térre vonatkozó formulánk ezt a B_{st} -t adta meg.

Az általunk alkalmazott Coulomb-gerjesztés azonban más helyzetet teremt. A töltött lövedék mellett, hogy gerjeszti, az energia és tömegviszonyoktól függően meg is löki a célmagot, amely így kimozdul eredeti helyéről, a környező atomokkal

kölcsönhatva lefékeződik és valahol megáll. Feltehetjük a következő kérdéseket. Érez-e, és ha igen, mekkora mágneses teret a mozgásban levő atommag? Hol áll meg a meglökött atom, rácspozícióban, ahol a megfelelő sztatikus tér hat, vagy rácsközi helyzetben, ahol a fellépő belső térről semmit sem tudunk mondani. A lefékeződő atom nem változtatja-e meg a sorozatos energiaátadással oly módon környezetét, hogy a várt belső tér nem tud többé kialakulni?

Az első kérdésre a következőket válaszolhatjuk:

Grodzins és munkatársai azt találták, hogy egy gyorsan mozgó atommag, amely ferromágneses anyagban (pl. vasban) mozog, igen intenzív tranziens mágneses teret érez [28]. Kísérleteikben 30–40 MeV energiájú oxigén ionokat használtak Coulomb-gerjesztésre, mely ionok a gerjesztés mellett 10–15 MeV visszalökődési energiát adtak a gerjesztett magoknak. A tranziens tér mindig pozitív, azaz a hordozó mágnesesével párhuzamos irányúnak adódott. A mérések nem közvetlenül a tranziens tér értékét adták, hanem a tér okozta impulzusszerű szögelfordulást, mely nehezebb magoknál 1000–2000 T · psec nagyságot is elért. A tranziens terek fellépése lényegesen befolyásolhatja a mágneses nyomatók meghatározását, hiszen az eredő szögelfordulás ekkor két tag, a tranziens és a sztatikus elfordulás összegéből áll:

$$\omega\tau_{\text{mér}} = \omega\tau_{\text{st}} + \omega\tau_{\text{tr}}.$$

Mivel $\omega\tau_{\text{st}}$ arányos a gerjesztett állapot élettartamával, a csökkenő élettartamok irányába a psec nagyságrendű ideig ható tranziens tér okozta járulék szerepe egyre nő. Egy mérés kiértékelése szempontjából döntő kérdés, hogy a vizsgált esetben fellépett-e tranziens tér vagy nem. Félémpirikus megfontolások alapján valószínűsíthető, hogy a ferromágneses mátrix-atomok polarizált *d*-elektronjainak Bohr-sebességénél kisebb sebességű meglökött atomok magjai már nem érznek tranziens teret [28]. Ezek a megfontolások ugyanis a tranziens terek felléptét úgy magyarázzák, hogy a nagy sebességű meglökött atomok ionizálódnak, majd, ha az előbbi Bohr-sebességre lassulnak le, nagy valószínűséggel fognak be polarizált *d*-elektronokat, és ezek az elektronok keltik a mozgó atommag helyén a tranziens teret, mely természetesen megszűnik, ha az egyensúlyi elektronszerkezet helyreáll. A modell semmilyen további mennyiségi megállapítást nem tud tenni. *Lindhard és Winther* elméleti számításai viszont, melyek a tranziens teret annak tulajdonítják, hogy a ferromágneses hordozó polarizált elektronjai szóródnak a visszalökődő magon, jól egyeznek a kísérleti adatokkal a visszalökődési energia — és targetmegtöltés — függés tekintetében, de a tranziens terek okozta szögelfordulás abszolút nagyságára csak kb. feleakkora értékeket adnak, mint a mérési eredmények [29]. Az eltérés oka éppen az lehet, hogy magából az elméletből semmilyen alsó sebességhatár nem következik, a szerzők többé-kevésbé önkényesen választottak alsó határt, és miután ez a kritikus sebesség a szögelfordulás kiszámításánál integrálási határként szerepel, megválasztása érzékenyen befolyásolja az elfordulás nagyságát. Számos kísérlet történt annak megállapítására, hogy a polarizált *d*-elektronok Bohr-sebességének megfelelő energiánál kisebb visszalökődési energiájú atomok esetén van-e tranziens tér vagy nincs. *Herskind és munkatársai* különböző vastagságú nem mágneses fékező rétegeken keresztül lőtték be a vizsgált magokat a felmágnesezett vas hordozóba [30]. *Cameron és munkatársai* finoman változtatták a bombázó energiát és ezen keresztül a visszalökődési energiát [19]. *Varga és Koicki* (α, γ) perturbált szögkorrelációt vizsgált, ahol a kibocsátott α -rész lökte vissza a gerjesztett állapotba került magot a kritikus sebességnél jóval kisebb

sebességgel [31]. Ezek a kísérletek, bár a mérési hibák meglehetősen nagyok, valószínűsítik, hogy alacsony visszalökődési energiákon nem lép fel tranziens tér. Az általunk használt 2,5 MeV energiájú protonok kb. 100, ill. 200 keV visszalökődési energiát adnak a ^{103}Rh , ill. ^{51}V magoknak, melyek kicsik a kb. 700, ill. 350 keV kritikus energiákhoz képest, így arra az álláspontra helyezkedünk, hogy esetünkben tranziens tér nem lép fel.

A második és harmadik kérdésre, azaz arra, hogy hol áll meg a gerjesztett mag és nem okoz-e jelentős sugárzási károsodást, a következőket válaszolhatjuk:

Közvetlen channeling-effektus segítségével történt implant helyzet meghatározások eredményei [32] megerősítik azt az elméleti várakozást, hogy a belőtt atomok zömmel rácspozícióban állnak meg [33]. Másrészt Coulomb-gerjesztést követő Mössbauer mérések [34] és pl. a ^{194}Pt magokon végzett perturbált szögeloszlásméréseink [21] azt mutatják, hogy a bombázás ellenére a gerjesztett magok a rácspozíciókban várható B_{st} sztatikus belső teret érzik.

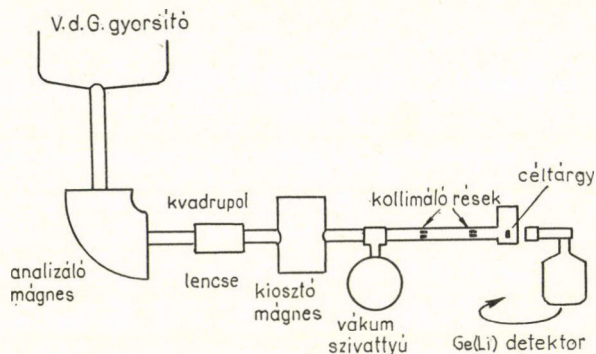
Meg kell még fontolnunk a hőmérséklet szerepét kísérleteinkben. A sztatikus hiperfinom terek hőmérsékletfüggése, a függés normális vagy anomális volta külön területe a szilárdtestkutatásnak [14, 26]. Számunkra elegendő, ha a bennünket érdeklő ötvözet belső terének hőmérsékletfüggése ismert, úgy a target hőmérsékletének ismeretében a hőmérséklet hatását könnyen korrekcióba vehetjük. A nehézség viszont éppen a target hőmérsékletének meghatározásában van. A gerjesztés helyének makroszkópikus közelségében természetesen lehetséges hőmérsékletet mérni pl. termopár segítségével. A gerjesztett mag azonban lefékeződése során pályája legvégén, mikor már csak nukleáris ütközések révén veszít energiájából, lokálisan jelentős felmelegedést (angol elnevezéssel „temperature spike”-ot) okozhat [35], kérdés, hogy ez a „spike” hogyan befolyásolja a sztatikus teret. Elképzelhető, hogy mivel a „spike” okozta helyzet igen gyorsan (10^{-11} – 10^{-12} sec) visszajut a termikus egyensúlyi helyzetbe, a belső teret meghatározó elektronspineknek nincs idejük, hogy irányukat megváltoztassák, és így a „spike” nem befolyásolja a hiperfinom tér nagyságát. Természetesen az is lehetséges, hogy bizonyos ideig nincs belső tér, és csak az egyensúly beálltával épül újra fel. A „spike” rövid élettartama miatt ez a hatás csak rövid élettartamú nívók, az általunk vizsgált gerjesztett állapotok közül csak a kb. 7 psec élettartamú 295 keV energiájú ródiom nívók esetében válhat észrevehetővé. A közel-múltban megmértük a ^{56}Fe izotóp első, 13 psec élettartamú állapotára vonatkozó szögelfordulást Coulomb-gerjesztéssel és visszalökődésmentes, rádióaktív forrás segítségével végrehajtott perturbált szögkorrelációs módszerrel is. A két mérés eredménye hibán belül egyező eredményt adott, azt mondhatjuk tehát, hogy az általunk elért pontosságon belül a „temperature spike” nem befolyásolja a sztatikus hiperfinom teret.

A fejezet befejezéséül összefoglaljuk mérési módszerünket. A vizsgálni kívánt izotópokat vasba ötvözve ferromágneses céltárgyat készítettünk. A céltárgyat 2,5 MeV energiájú protonokkal Coulomb-gerjesztettük, és mértük a gerjesztést követő γ -sugarak perturbátlan és a hiperfinom tér által perturbált szögeloszlását és meghatároztuk a hiperfinom kölcsönhatásra jellemző szögelfordulást. A dolgozat következő részében a kísérleti berendezést, a mérésekkel kapcsolatos kísérleti nehézségeket és az elvégzett kísérleteket írjuk le.

4. Kísérleti rész

4.1. A mérőberendezés leírása

A perturbált szögeloszlásmérésekhez használt mérési elrendezés elemei vázlatosan a 7. ábrán láthatók. A felgyorsított protonokat a KFKI 5 MV-os EG—2R nyomás alatti Van de Graaff generátora szolgáltatta. A targetterembe függőlegesen érkező nyalábot 90° -os analizáló mágnes térítette vízszintes irányba, a nyaláb fókuszálását mágneses kvadrupol lencse végezte. A fókuszált nyaláb a kiosztómágnesen áthaladva a kollimátor résein keresztül jutott a targetszerelvénybe. Mivel méréseinket az úgynevezett egyenes ágban végeztük, a kiosztó mágnes nem változtatta meg lényegesen a nyaláb irányát, csupán a nyaláb pontos beállítását segítette elő.



7. ábra. A PAD mérési elrendezés elemei

A kollimátor-rész két, egymástól 70 cm távolságra levő rés párból állt. Egy rés párt két ki-beforgatható aranylemez alkotott, melyekben egy vízszintes, illetve függőleges bevágás volt. A nyaláb útjába beforgatott rések a céltárgytól távolabb egy $2 \times 2 \text{ mm}^2$ -es, a céltárgyhoz közelebb pedig egy $1 \times 1 \text{ mm}^2$ -es nyílást képeztek. A résen áthaladó nyaláb a céltárgyat kb. 1 mm^2 -es foltban érte a kisebbik réstől 20 cm távolságban.

A céltárgytartó edény metszetét a 8. ábrán láthatjuk. Amint azt már korábban említettük, méréseinkben a ferromágneses anyagokban fellépő nagy mágneses tereket használtuk a kívánt perturbáció eléréséhez. Ahhoz azonban, hogy a céltárgyban mindenütt azonos irányú belső tér legyen, a céltárgy ötvözetet telítésig kell mágnesezni. Ezt a feladatot a 3 mm légrésű gyűrű alakú elektromágnes végezte. Magát a céltárgyat egy, a mágnessel közös talpazatú vörösréz „záslótartó” tartotta a légrésben (az ábrán nincs feltüntetve). Az ábrán látható kis tartályban levő folyékony nitrogén a közös talpazat segítségével mind a céltárgyat, mind a mágneszt hűtötte. A céltárgy hűtésére azért volt szükség, nehogy az a ferromágnesség megszűnését jelentő Curie hőmérsékletéhez közeli hőmérsékletre melegedjék fel a bombázás hatására. A lehűtött elektromágnes tekercsének ellenállása pedig lényegesen kisebb volt, mint szobahőmérsékleten, és így jóval kisebb teljesítmény is elegendő volt a mágnes táplálásához. Átlagos körülmények között a kis tartály egy órára elegendő cseppfolyós nitrogént volt képes tárolni. A hűtőegységet és az alumínium céltárgytartó edényt

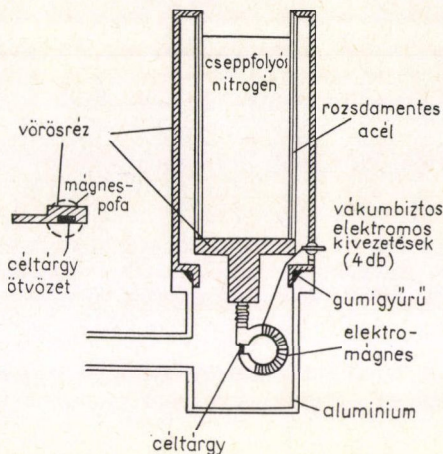
mechanikailag külön nem erősítettük össze, a két részt a külső légnyomás szorította össze. A céltárgy körül uralkodó $\sim 10^{-5}$ mbar vákuumot olajdiffúziós szivattyú biztosította. A céltárgy cseréknél csak le kellett levegőzni a rendszert és az egész hűtőegységet a céltárggyal és a mágnessel együtt könnyen ki lehetett emelni.

A 8. ábrán a bombázott céltárgyak formáját is láthatjuk. A vizsgálni kívánt ötvözetekből kb. $5 \times 3 \times 1$ mm³ nagyságú téglatesteket alakítottunk ki és forrasztottuk be a vörösréz tartóba, melyet a már említett „zászlótartó” rögzített a mágnes-pofák között.

A kollimátor és a céltárgytartó edény mechanikailag rögzített egységet alkotott, miután optikailag beállítottuk, hogy a részek és a céltárgy egy egyenes mentén helyezkedjenek el. A protonnyalábnak a részek által meghatározott becsapódási helyére pontoszerű ⁵⁷Co γ -forrást helyeztünk és a kollimátor-céltárgy rendszert finoman addig állítottuk, amíg a forrás körül (azaz a későbbi nyalábfolt körül) forgatott detektor a különböző irányokból azonos γ -sugár intenzitást mért. Ezzel a beállítással, melyet megfelelően rögzítettünk, elértük, hogy a nyalábfolt pontosan a céltárgy körül körbeforgatható detektorok forgástengelyére essék.

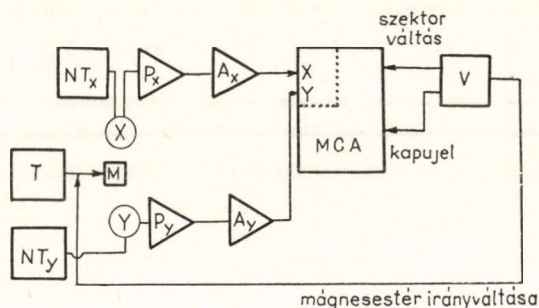
A perturbált szögeloszlás kiméréséhez a Coulomb-gerjesztett állapotok által kibocsátott γ -sugarakat kell a protonnyalábhöz képest különböző irányokból kimérni. A minél jobb energiafelbontás érdekében koaxiális vízszintes elrendezésű Ge(Li) félvezető detektorokat használtunk, melyeket a céltárgy körül az intézetben készült állvány segítségével kézzel lehetett körbeforgatni $\pm 2,80$ rad szögtartományban. A mérések zömében egy 25 cm³ aktív térfogatú Nuclear Enterprises és egy 30 cm³-es csehszlovák detektort használtunk. A 25 cm³-es detektort később egy 75 cm³-es „ γ -tech” típusú amerikai detektorral cseréltük fel. Mindhárom detektorral kb. 3 keV energiafelbontást értünk el a számunkra érdekes 300 keV-es energiatartományban. A legelőször végzett 5%-os Fe—V ötvözzel történt méréseknél egy 4 cm³-es csehszlovák Ge(Li) detektort használtunk.

Bár elvben mind a perturbálatlan, mind pedig a perturbált szögeloszlás kimérésére egy detektor is elegendő lett volna, a normálási nehézségek elkerülése végett egyszerre mértünk két detektorral és az egymással elosztott beütésszámokat használtuk a további számításokhoz. (A normálási nehézségek onnan adódnak, hogy a gerjesztett állapotokat létrehozó protonnyaláb intenzitása időben nem állandó, így az egyes mérések időtartama nem jó összehasonlítási tényező. Természetesen megoldható a beérkezett töltés, azaz a gerjesztő protonok számának pontos mérése, de ez a módszer sem ad kielégítő eredményt. A mérőrendszer holtideje miatt ugyanis nem közömbös, hogy ugyanaz a töltésmennyiség mennyi idő alatt, pontosabban milyen időeloszlásban érkezett be. Ha egyszerre sok proton érkezik, azaz megnő a pillanatnyi áramerősség, a megnövekedett holtidő miatt a rendszer viszonylag ke-



8. ábra. A céltárgytartó edény metszete

vesebb, lecsökkent áramerősségnél pedig viszonylag több beütést számlál. Az egymást követő mérések során az áramingadozások okozta hamisítás természetesen általában különböző.) A használt elektronika blokkvázlatát a 9. ábra mutatja. A detektorok jeleit

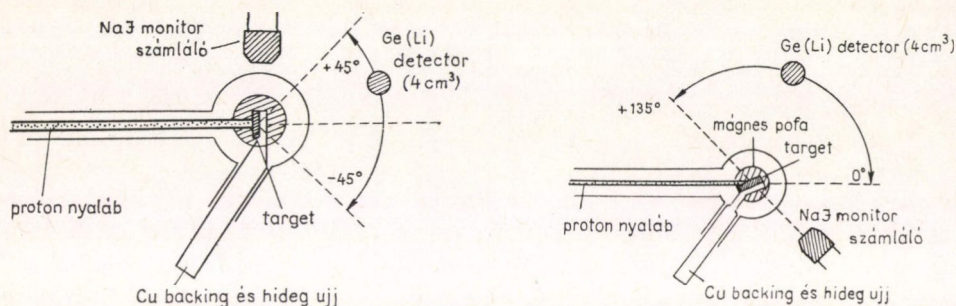


9. ábra. Az elektronika blokkvázlata

T: tápegység, *NT:* nagyfeszültségű tápegység, *P:* előerősítő, *A:* erősítő, *MCA:* sokcsatornás amplitúdó analizátor, *V:* vezérlő automatika, *M:* mágneses gerjesztés, *X,* *Y:* detektorok

kis zajú töltéserősen előerősítőkön keresztül a Technikai Főosztályon készült formáló erősítőkkel felerősítettük és egy a KFKI-ban gyártott 4096 csatornás analizátor mátrix-analóg-digitál-átalakítójának (MADA) két bemenetére vezettük (*X* és *Y* bemenet). A MADA „*X* or *Y*” üzemmódja lehetővé tette, hogy a két detektorral egyidejűleg mérjünk. Az analizátor az egyik detektor spektrumát (nevezzük *X*-detektornak) az első 256 csatornájában, a másik (*Y*) detektor spektrumát pedig a második 256 csatornájában tárolta. A két bemenetnek közös holtidő rendszere volt, így az analizátor a két detektor jeleinek intenzitás arányát nem tudta megváltoztatni, bármennyire is ingadozott a gyorsító árama. Szögeloszlásméréseknél az egyik detektort a bombázó nyálábhoz képest különböző szögállásokba helyeztük, míg a másik detektor állandóan ugyanazon a rögzített helyen maradt. A mágneses tér okozta perturbáció mérésekor külön vezérlő berendezés váltogatta a mágnesező tér irányát előre beállítható időszakonként. Ha a mágneses tér az általunk önkényesen „+”-nak jelölt irányú volt, az analizátor az első 512 csatornás szektorába tárolta a két detektor spektrumát, ha a vezérlő „-” irányúra váltotta át a teret, egyben az analizátor szektorát is váltotta, és a jelek most már a második 512 csatornába gyűltek. A mágneses tér irányváltozásának időtartamára, 0,8 másodpercenyi ideig, az esetleges zavarok elkerülése végett a vezérlő berendezés letiltotta az analizátor bemeneteit. A mágnesező elektromágnes egy 2×24 V-os párhuzamos üzemmódban működtetett tranzistoros tápegység gerjesztette. Hall-szondás térmérővel végzett méréseink szerint 1,5 A gerjesztőáram $\sim 119 \cdot 10^3$ A/m erősségű teret hozott létre. A fent ismertetett mérési elrendezés folyamatos fejlesztés és finomítás eredményeképpen alakult ki, a mérések nagy többségét ezzel az elrendezéssel végeztük. A legelőször végzett 5%-os vanádium tartalmú ötvözet mérései azonban kivételt képeztek. Az ezekben a mérésekben használt elrendezés abban tért el lényegesen a végső változattól, hogy csak egy félvezető detektort tartalmazott, a mágnes nem volt a vákuumtérben és a céltárgy lehűtését cseppfolyós nitrogénbe nyúló hideg ujjal oldottuk

meg. A mérések normálását egy NaI(Tl) detektor spektrumával végeztük. Ez a detektor a vas mátrix gerjesztéséből származó 845 keV energiájú γ -sugárzás intenzitását mérte rögzített helyzetben. A ^{56}Fe izotóp 845 keV-es állapotának oly rövid az élettartama, hogy a mágnester okozta perturbációt a kiértékelés során elhanyagolhattuk. Az egy detektoros elrendezés első és második módosított változatát a 10. ábra mutatja.

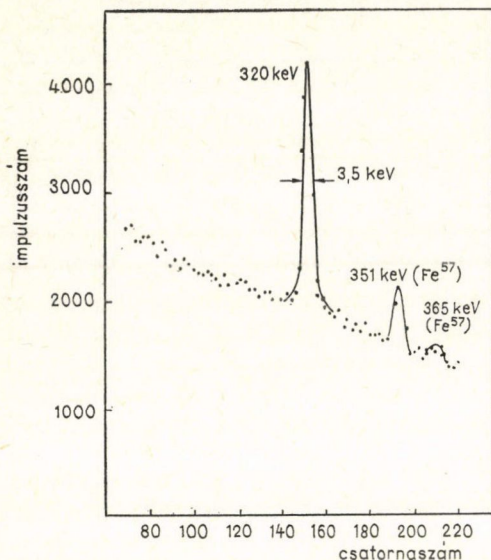
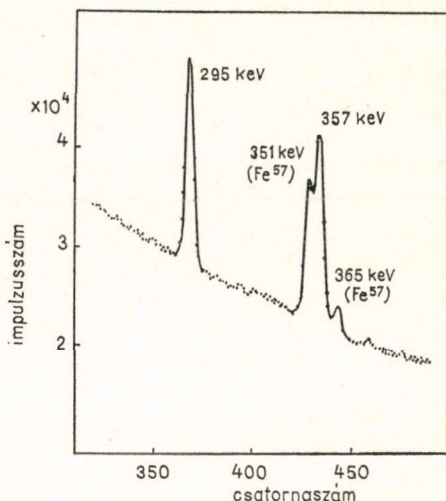


10. ábra. Az egy detektoros elrendezés első (a) és második (b) változata

A mérésekhez használt céltárgyak három csoportba oszthatók. Az 1, 2 és 5 atomszázalékos Fe—V ötvözeteket Konczos Géza készítette a KFKI Szilárdtestfizikai laboratóriumában. A $\sim 99,8\%$ -os tisztaságú vákuumban átolvasztott ARMCO-vasat vákuumindukációs kemencében 10^{-2} mbar nyomáson olvasztotta össze a $\sim 99,9\%$ -os tisztaságú átolvasztott vanádiummal. A 3, 10, 15, 40 és 47%-os Fe—V ötvözeteket Vincze Imre bocsátotta rendelkezésünkre. A 3, 15, 20, 25, 30, 35 és 48,5 atomszázalékos Fe—Rh ötvözetek szintén a Szilárdtestfizikai Főosztályon készültek négy kilences tisztaságú fémporokból 1100°C -on való szintereléssel. Az ötvözetek összetételének ellenőrzése klasszikus analitikai módszerekkel történt.

4.2. A mérési adatok kiértékelése

Az előző fejezetben leírtak szerint a közvetlen mérési eredmények a sokcsatornás amplitúdóanalizátorban felvett γ -spektrumok voltak. Egy-egy jellegzetes amplitúdó-impulzusszám eloszlást a 11. és a 12. ábrán láthatunk. A 11. ábra 5% Fe—V, a 12. ábra 3% Fe—Rh céltárggyal felvett γ -spektrumot mutat. A további számítások alapjául szolgáló csúcs alatti területeket ezekhez hasonló spektrumokból kellett meghatározni. Mivel a sokcsatornás analizátor egy csatornájában maximálisan $2^{16}-1$, azaz 65 535 impulzus tárolható és a mérési körülményeink között általában néhány óra alatt jött be egy csúcsban ilyen nagyságrendű beütésszám, nagyon sok (több száz) spektrumot kellett kiértékelnünk. Az ilyen nagy sorozatban végzett mérések egy jól használható mérési kiértékelési rendszer kidolgozását követelték meg. Ezt a munkát egy Pócs Lajos vezette csoport végezte, mely munka eredményeképpen létrejött az ALGOL nyelvű SIRIUS programrendszer [36]. A mi méréseinkben alapvetően fontos MPN1 csúcsterület meghatározó program elkészítésében a dolgozat szerzője is lényeges szerepet vállalt, de a további segédprogramok kidolgozásában és a rendszer megszerkesztésében nem vett részt.

11. ábra. 5 at%-os Fe-V ötvözet γ -spektruma12. ábra. 3 at%-os Fe-Rh ötvözet γ -spektruma

Az alábbiakban tömören vázoljuk a kiértékelés menetét. Az analízátor a csatornatartalmat 8 soros lyukszalagon az Intézet ICT—1905 számítógépe által használt kódban adta ki. Az így kapott spektrumokat az azonosításhoz szükséges információkkal (mérés fajtája, időpontja, a céltárgy milyensége, jegyzőkönyv sorszáma stb.) együtt folyamatosan mágnesszalagra vittük fel az MPAA nevű programmal. Az összes, a spektrumokkal foglalkozó további program (rajzoló, csúcsmeghatározó programok) az MPAA program által adott sorszám alapján találta meg és dolgozta fel a mérési adatokat. Ezzel a módszerrel lényegesen gyorsult és kényelmesebbé vált a kiértékelés. A biztonság kedvéért az MPAA automatikusan két azonos tartalmú mágnesszalagot készített.

A csúcsok alatti területek meghatározását az MPN1 program végezte. Amint azt a 12. ábrán is jól láthattuk, a jól elkülönült csúcsok mellett egymáshoz nagyon közel eső, egymást részlegesen átfedő csúcsok is előfordultak. Éppen az ilyen csúcscsoportok kiértékeléséhez vált szükségessé görbeillesztő program kidolgozása, mivel ilyen esetekben a háttér tisztességes levonása másképpen nem lehetséges. A mérési pontokhoz az MPN1 program általában az alábbi függvényeket illesztette:

$$F_k(j) = a_{k1} + a_{k2} \cdot j + a_{k3} \cdot j^2 + \sum_{i=1}^{i_{\max}(k)} G_{ki}(j), \quad \begin{matrix} 1 \leq k \leq 30 \\ 1 \leq i \leq 30 \end{matrix}$$

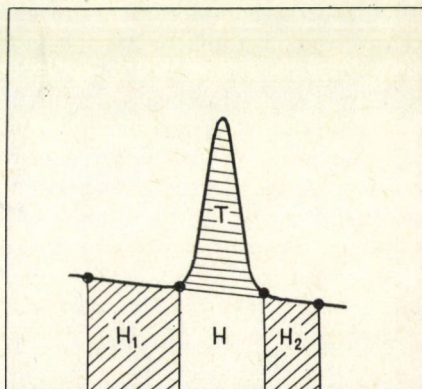
ahol a $G_{ki}(j)$ függvények Gauss-görbék, a kis a_k -k pedig állandók, a j változó a csatornaszámot jelöli. A k index arra utal, hogy egy adott spektrum különböző (esetenként egymásba nyúló) tartományaira egyidejűleg illeszthető a fenti alakú függvény, a Gauss-görbék száma ezért függ k -tól. Az egyidejűleg szó itt azt jelenti, hogy a számítógép beolvassa a kívánt spektrumot a mágnesszalagról és rendbe a k -dik tartományra ráilleszti a k -dik függvényt, és ha ezt befejezte, akkor tér rá a következő

spektrumra, vagy ha ilyen nincs, befejezi a futást. Az F_k függvény első három tagja a háttérrel közelíti. Az adatszalatgtól függően az összes a_{k_3} zérussá tehető, azaz ebben az esetben parabola helyett egyenessel közelítjük a háttérrel.

Az illesztést magát a program a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével végezte. Mivel a radioaktív bomlás Poisson-eloszlást követ, az egyes csatornák tartalmának szórásnégyzete magával a csatornatartalommal egyezik meg, így a súlyfaktorok a csatornatartalmak reciprok értékei voltak. Az illesztendő függvény a meghatározandó paramétereknek nem lineáris függvénye, ezért a gép a függvényt a paraméterek becsült kezdőértékei körül sorbafejtette és az első tagoknál megállt; így a paraméterek megváltozásában most már lineáris függvényt kapott. A legkisebb négyzetek módszerével tehát a kezdő értéktől való eltéréseket határoztuk meg. A sorfejtés gyors levágásából eredő hibát iterációval tettük jóvá. A gép számára csak a csúcsok várható helyeit és az illesztésnél figyelembe veendő tartomány határait kellett megadnunk, a kezdőértékeket már a gép maga határozta meg. Az iterációval akkor állt le, ha a paraméter változása, vagy az illesztés jóságára jellemző χ^2 mennyiség megváltozása már egy előírt mértéknél kisebb volt. Négy iterációt mindenképpen elvégzett a gép, de ha valamilyen okból 12 iterációs lépés sem volt még elegendő, úgy abbahagyta a számolást, jelezve, hogy a spektrummal kapcsolatban valami probléma lehet (pl. „kiejtett” csatornatartalom, nagyon rosszul megadott várható csúcshely).

Természetesen sem a háttérre vonatkozó parabola feltevés, sem pedig a csúcsra vonatkozó Gauss-görbe feltevés nem teljesül szigorúan. Az irodalomban igen nagy számú vizsgálatot végeztek a félvezető detektorokkal mért γ -spektrumok alakjára vonatkozólag. Több-kevesebb eredménnyel sikerült bonyolult aszimmetrikusan módosított Gauss-görbékkel jó illesztést elérni, az ilyen programok azonban jóval nagyobb és gyorsabb számítógépet igényelnek, mint amilyen rendelkezésünkre állt. A kiértékelések során arra a következtetésre jutottunk, hogy nagy háttéren ülő kicsi csúcsok esetén általában jó illesztést, azaz 1-hez közeli értékű redukált χ^2 -t kapunk. A statisztikus hiba ilyenkor természetesen nagy, de ez a hiba a mérések számának növelésével csökkenthető. A háttérből jól kiemelkedő nagy intenzitású csúcsok esetén viszont a χ^2 nagyon megnőtt, mivel a csúcs alakjának a Gauss-görbétől való eltérése statisztikailag szignifikánssá vált. Éppen ezért 10 000—15 000 maximális beütésszámnál rendszerint abbahagytuk a mérést, az eredményt lyukszalagra rögzítettük, majd újabb mérést kezdtünk.

Bizonyos esetekben, így a nagyobb vanádium koncentrációjú Fe—V méréseknél és a 295 keV energiájú ródium vonal esetében, a háttér annyira egyenletes volt, hogy feleslegesnek bizonyult az illesztéses számítógépes eljárás végrehajtása. Kielégítőnek bizonyult a következő módszer: a csúcs jobb, illetve bal oldalán kiválasztott egyenes háttérszakaszok segítségével háttérrel interpoláltunk a csúcsok alá és a csúcs alatti beütésszámok összegéből levontuk az így meghatározott háttérimpulzusokat. A 13. ábrán láthatjuk a számításban előforduló területeket. Ezt a munkát a speciális



13. ábra. Az egyszerűsített háttérlevonás számításánál használt területek

„interface”-el ellátott TPA kiszámítógéppel végeztük az ANAL-EVAL-PLOT nevű gépi kódban írt program segítségével [37]. A lyukszalagról beolvasott spektrum megjelent a gép megjelenítő ernyőjén, ahol fénylő pontokkal kijelöltük a csúcst és a háttérszakaszokat. Ezen pontok birtokában a gép elvégezte a szükséges számításokat és kiadta hibáikkal együtt a csúcs alatti területeket. A program ANAL- része azt is lehetővé tette, hogy a sokcsatornás analizátor helyett a TPA-val mérjünk, ilyenkor a mérés befejeztével azonnal el tudtuk végezni a kiértékelést. Sajnos a TPA gyakori meghibásodása miatt csak ritkán tudtunk ilyen módon dolgozni.

A különböző szögekben mért beütésszámokból a szögeloszlási együtthatókat szintén számítógéppel határoztuk meg. Az integrális szögeloszlásmérések kiértékelésére szolgáló MPSZ nevű ALGOL program az alábbi függvény legkisebb négyzetek módszerével történő illesztését tudta elvégezni:

$$W(\theta, \pm B) = N_0 \left\{ 1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k}{1 + (k\omega\tau)^2} [\cos k\theta \pm k\omega\tau \sin k\theta] \right\},$$

mely függvény az N_0 normálási tényezőtől eltekintve ekvivalens a már korábban tárgyalt perturbált szögeloszlásfüggvényvel. ($\omega\tau=0$ helyettesítéssel kapjuk a szögeloszlásmérések kiértékeléséhez szükséges függvényt.)

4.3. Az elvégzett mérések

4.3.1. Szögeloszlás mérések

Az ^{51}V izotóp Coulomb-gerjesztést követő 320 keV energiájú γ -sugárzásának szögeloszlását a 10a. ábrán látható elrendezéssel (a továbbiakban 1. elrendezés) mértük tiszta vanádium céltárggyal. A félvezető detektort 0° , 30° , 60° , 120° és 135° -os szögekbe állítottuk. Mivel a céltárgy $22,5^\circ$ -os szögbe zárt be a nyaláb irányával, a 0° -os helyzetben abszorpciós korrekciót kellett végeznünk.

Egy-egy mérést mindig azonos beérkező protonmennyiséggel végeztünk, a bejövő töltést áramintegrátorral mértük. Az integrátor mechanikus számlálója minden 10^{-6} C beérkezett töltés hatására ugrott eggyel tovább („kattant”). Egy-egy mérés néhány ezer „kattanásig” tartott, ami időben 1 órát jelentett, mivel a protonáram átlagosan $1\mu\text{A}$ erősségű volt az összes mérés során. A mérések eredményül $b=0,123(11)$ szögeloszlási együtthatót adtak, mely $a_2A_2=0,171(15)$ Legendre-polinomok szerinti sorfejtési együtthatónak felel meg. Az MPSZ programmal az illesztéskor először b_4 értékét is kerestük, de mivel minden illesztés hibán belül $b_4=0$ értéket adott, a végső kiértékelésnél már eleve csak a $k_{\max}=2$ esetnek megfelelő szögeloszlásfüggvényt illesztettünk, a fenti eredmény is így adódott. Ez a számítás kisebb statisztikus hibát adott és az illesztés jósága is nőtt.

A ^{103}Rh izotóp 295 és 357 keV energiájú γ -sugárzásának szögeloszlását már a végleges két detektoros elrendezéssel mértük, tiszta ródium céltárggyal. Az Y detektor a mérések során mindvégig -135° -os szöghelyzetben volt, míg az X detektort rendre 90° , 110° , 135° és 155° -os szöghelyzetekbe állítottuk, és a mért beütésszámokat mindig elosztottuk az Y detektor megfelelő beütésszámával. Ekkor a beérkező töltésmennyiség mérésének már nem volt jelentősége, a „kattanásokat” csupán a gyorsítóáram egyenletességének ellenőrzésére használtuk. Az illesztéssel a vanádium ese-

téhez hasonlóan csak a b_2 együtthatót kerestük. A 295 keV energiájú állapotra $b_2 = -0,2024(21)$, a 357 keV-es állapotra $b_2 = 0,1673(15)$ értékeket kaptunk. A szögeloszlásmérések eredményeit az I. táblázat foglalja össze.

I. TÁBLÁZAT

A szögeloszlás mérések eredményei

Z_A	$E(\text{keV})$	J^π	b_2	$a_2 A_2$	a_2	A_2	A_2^*
^{51}V	320	$5/2^-$	0,123(11) 0,120(9) 0,121(7)	0,171(15) 0,166(13) 0,168(10)	0,69	0,244(14)	0,240(30) ^a 0,239(15) ^a
^{103}Rh	295	$3/2^-$	-0,2024(21)	-0,253(3)	0,72	-0,357(4)	-0,367(9) ^b
^{103}Rh	357	$5/2^-$	0,1673(15)	0,236(2)	0,81	0,291(3)	0,286 ⁺

⁺ az [1] alatti cikk alapján számolt érték

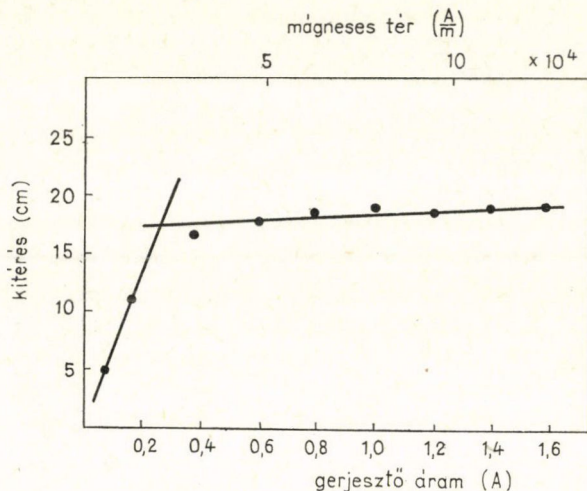
^{*} irodalmi adatok

^a, a [40] hivatkozás

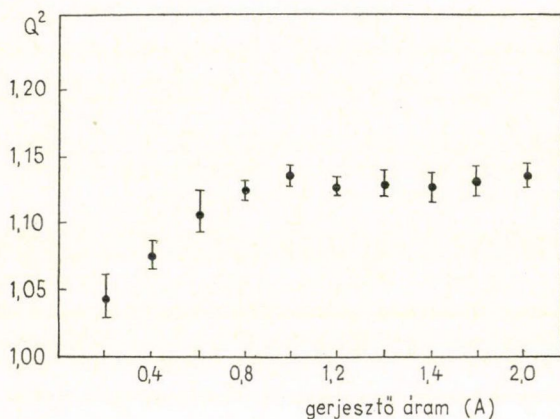
^b, az [50] hivatkozás

4.3.2. A céltárgy mágnesezettségének vizsgálata

Ahhoz, hogy az összes kérdéses mag helyén azonos irányú és nagyságú belső mágneses tér hasson, a céltárgyat telítésig kell mágnesezni. A Fe—V ötvözeteknél a következőképpen határoztuk meg a telítéshez szükséges gerjesztő áram nagyságát. A mágnespólok közé helyezett céltárgyakra néhány száz menetnyi vékony rézhuzalt tekercseltünk, a tekercs végeit ballisztikus galvanométerhez kötöttük, amely a fluxusváltozással arányos amplitúdójú kilengést végzett a minta átmágnesezésekor. Különböző erősségű árammal gerjesztettük a mágneset, majd egy irányváltó kapcsoló segítségével átmágnesztük a mintát. A telítéshez szükséges áramerősséget az áram — kilengés karakterisztikák töréspontjaiból határoztuk meg. A különböző ötvözetek görbéi nagyon hasonlóak voltak egymáshoz, példaként a 14. ábra a 40%-os Fe—V ötvözetrel végzett mérést mutatja. Felmerülhet azonban az a kérdés, hogy a telítésig mágnesezett mintának azon vékony felületi rétege, ahol a Coulomb-gerjesztések történnek, szintén telített-e? Erről a fenti durva, bár világszerte általánosan használt módon nem lehet meggyőződni. A legbiztosabb módszer az, ha éppen a kérdéses magok helyén mérjük meg a belső tér nagyságát a mágnesező áram függvényében, mégpedig ugyanazzal a perturbált szögeloszlás módszerrel, mellyel a mágneses nyomatókat mérjük. A később ismertetendő módon szögelfordulás méréseket végeztünk egyre növekvő gerjesztőáram értékek mellett. A 15. ábrán a 3%-os Fe—Rh ötvözetrel végzett mérés eredményét láthatjuk. (A függőleges tengelyen a szögelfordulást ábrázoltuk önkényes egységekben.) A két módszerrel végzett mérések azonos eredményre vezettek, nevezetesen arra, hogy $\sim 1,2$ A gerjesztőáram, azaz $\sim 95,5 \cdot 10^3$ A/m erősségű mágneses tér elegendő a telítéshez. A biztonság kedvéért a mérések során 1,5 A erősségű gerjesztő áramot alkalmaztunk.



14. ábra. A 40 at%-os Fe—V ötvözet mágnesezési görbéje



15. ábra. A 3 at%-os Fe—Rh ötvözet mágnesezési görbéje

4.3.3. Szögelfordulás mérések

Mint azt már a bevezetésben említettük, mérésünk legfőbb részét a perturbált szögeloszlásfüggvények kimérése alkotta. Időintegrális mérés esetén általában két szokásos eljárás kínálkozik. Ez egyik módszer az, hogy mágneses tér jelenlétében teljes szögeloszlás mérést végzünk, majd a mért perturbált szögeloszlásfüggvényből egyszerre határozzuk meg a szögeloszlási együtthatókat és a mágneses kölcsönhatásra jellemző szögelfordulás $\omega\tau$ értékét.

Az 5 %-os Fe—V ötvözzel ilyen mérést végeztünk a 10b. ábrán látható II. elrendezés segítségével. A félvezető detektort $\pm 45^\circ$, $\pm 22,5^\circ$ és 0° -os helyzetekbe hoztuk és

mértük a 320 keV energiájú sugárzás erősségét. Az elrendezés geometriája mutatja, hogy ezeknél a méréseknél minden szöghelyzetben abszorpciós korrekciót kellett végeznünk. Az esetleges geometriai hibák okozta nehézségek elkerülése végett felfelé és lefelé mutató mágneses térben végeztünk méréseket, a két esetben a szögelfordulásnak azonos nagyságúnak, de ellenkező irányúnak kell lennie. A mérési pontokból az MPSZ program segítségével a

$$b_2 = 0,120(9), \quad \text{ill.} \quad \omega\tau = 0,170(25)$$

eredményeket kaptuk.

A szögelfordulás másik mérési módszere olyan, hogy a szögeloszlási együtthatók, ill. a szögelfordulások mérése külön-külön történik. Először tiszta, nem ferromágneses céltárggyal mágneses tér nélkül meghatározzuk a perturbálatlan szögeloszlások együtthatóit (ezeket a méréseket tartalmazta a 4.3.1. fejezet). Második lépésként pedig megmérjük a mágneses tér hatását az immáron ismert alakú szögeloszlásra.

Ha a szögeloszlás $\sim 1 + b_2 \cos 2\theta$ alakú, mint az általunk vizsgált esetekben mindig, könnyen kimutatható, hogy $\pm 135^\circ$ -ban elhelyezett detektorok észlelik a legnagyobb γ -sugárzás intenzitás változást, ha a céltárgyat mágneses térbe helyezzük. Ezeknél a méréseknél is célszerűbb az ellenkező irányú mágneses térrel végzett méréseket összehasonlítani, ekkor egyrészt a változás kétszer akkora, másrészt az esetleges geometriai bizonytalanságok is kiesnek.

Az 5%-os Fe—V ötvözetet az egydetektoros I. elrendezés segítségével vizsgáltuk, megmérve az úgynevezett aszimmetriát, vagyis 135° -os helyzetben levő detektornál képeztük a felfelé és lefelé mutató mágneses térrel kapott beütésszámokból az

$$\frac{R}{2} = \frac{N(\theta, \uparrow) - N(\theta, \downarrow)}{N(\theta, \uparrow) + N(\theta, \downarrow)}$$

mennyiséget.

Ezt az aszimmetriát 45° -os szögben levő detektorral is megmértük, ekkor az $R/2$ mennyiség nagyságra megegyező, de előjelben különböző kell, hogy legyen. A több mérési sorozat eredményeül $R/2 = 0,035(3)$ értéket kaptunk.

A többi (1, 2, 3, 10, 15, 40 és 47%-os) Fe—V ötvözetet és az összes Fe—Rh (3, 15, 20, 25, 30, 35 és 48,5%-os) ötvözetet már a végleges két detektoros elrendezéssel mértük. Az X detektort $+135^\circ$ -os, az Y detektort pedig a szimmetrikus -135° -os helyzetbe állítottuk. A fel-, illetve lefelé mutató mágneses térben végzett mérések eredményeiből az aszimmetria helyett a

$$Q^2 = \frac{N(Y, \uparrow) N(X, \downarrow)}{N(Y, \downarrow) N(X, \uparrow)}$$

mennyiséget képeztük. Ezzel a módszerrel, amint azt Varga László részletesen kimutatta a [20] dolgozatban, az eredmények nagy mértékben függetlenné váltak a mérési geometria pontatlanságaitól, az áramingadozások okozta beütésszám ingadozásoktól és a csúcs alatti területek meghatározásánál esetleg elkövetett pontatlanságoktól. A különböző összetételű ötvözetekkel végzett mérések eredményeit a II. és III. táblázatban összesítettük. Ellenőrzésképpen a korábbi 5%-os Fe—V ötvözetrel is végeztünk egy mérést ezzel a módszerrel.

II. TÁBLÁZAT

A Fe—V ötvözetekkel végzett
mágneseres mérések eredményei

V%	Q^2	ω (mrad)
0,5	1,146 (13)	158 (14)
1	1,152 (19)	165 (20)
2	1,143 (11)	154 (11)
3	1,149 (9)	161 (10)
5	1,145 (13)	164 (9)
	1,153 (8)*	
10	1,115 (4)	122 (6)
15	1,110 (4)	117 (6)
40	1,058 (5)	62 (6)
47	1,028 (4)	32 (4)

*Az aszimmetria mérésekből visszaszámolt ek-
vivalens Q^2 érték.

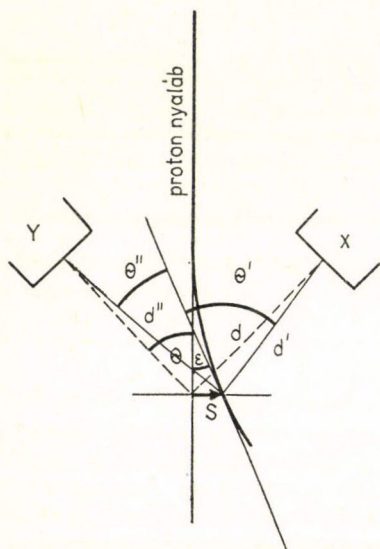
III. TÁBLÁZAT

A Fe—Rh ötvözetekkel végzett
mágneseres mérések eredményei

Rh%	Q^2_{357}	Q^2_{295}
3	1,146 (5)	0,971 (4)
15	1,148 (2)	0,968 (4)
20	1,132 (5)	0,977 (3)
25	1,117 (5)	0,976 (6)
30	1,100 (3)	0,981 (4)
35	1,097 (2)	0,985 (6)

4.3.4. A gyorsító nyalábeltérülésének vizsgálata

A belső mágneses tér irányítását végző elektromágnes természetesen nem csak a céltárgy helyén kelt mágneses teret, hanem a mágnes felépítésétől függően annak kisebb-nagyobb környezetében is. A gerjesztést okozó töltött protonnyaláb tehát az elektromágnes terében halad már azelőtt is, mielőtt a céltárgyat elérné. A gyorsan mozgó töltött részecskék a Lorentz erő hatására eltérnek eredeti irányuktól. A nyaláb ilyen elhajlása mérésünk szempontjából kettős következménnyel jár. A 16. ábrán

16. ábra. A protonnyaláb eltérülése
(beam bending)

látható módon az egyik hatás abban nyilvánul meg, hogy a nyaláb becsapódási foltja s távolságra eltolódik a mágnes tér nélküli helyzetétől, ezáltal a detektor — célpont távolságok megváltoznak. A másik hatás viszont az, hogy az eltérült nyaláb és a detektorok irányának szöge, azaz a képleteinkben szereplő θ szög sem egyezik meg a mágneses tér nélkül beállított szöggel. Ha eredetileg mindkét detektor θ szöget zárt be a kijelölt nyalábiránnyal, akkor a mágneses tér okozta ε nyalábeltérülés után a tényleges detektorszögek a 16. ábrán látható θ' , illetve θ'' szögekre módosulnak. A mágneseres méréseknél ezeket a változásokat, főleg ha a mérendő szögelfordulás kicsiny, gondosan figyelembe kell vennünk. A korrekciók gondos elvégzéséhez viszont s és ε értékét pontosan ismernünk kell. A nyaláb eltolódás és a nyaláb elhajlási szög meghatározása többféle módon történhet. Az egyik módszer az, hogy pontosan kimérjük az elektromágnes szórt terének térbeli eloszlását és végigkísérve a bombázó részecskék útját numerikusan

meghatározzuk s és ε értékét. Ilyen számításokat végzett az általunk is használt mágneses elrendezésre *Varga László* [20]. 1,5 A gerjesztő áramnál $\varepsilon=3$ mrad és $s=0,001$ cm értékeket kapott eredményül. Másik lehetséges módszer ε és s közvetlen kimérése, amely a következőképpen történt. Céltárgyként tiszta ródiumpot használva szabályszerű „ Q^2 ” mérést hajtottunk végre. A kapott Q^2 értékek (mind a 295 keV, mind a 357 keV energiájú állapotra vonatkozó Q^2 -t megmértük) egytől való eltérése ebben az esetben az elektromágnes nyalábelterítő hatásától eredhet. Q , s és ε között az alábbi kapcsolat teremthető:

$$1 - \frac{Q}{1 - \sqrt{2}s \left(\frac{1}{d_x} + \frac{1}{d_y} \right)} = \frac{2b_2(x - 2\varepsilon)}{1 + x^2 + b_2(x - 2\varepsilon)},$$

ahol $x=2\omega\tau$, d_x , illetve d_y pedig az X , illetve Y detektor távolsága a céltárgytól. Mivel tiszta Rh céltárgy esetén $\omega\tau=0$, a fenti összefüggés az

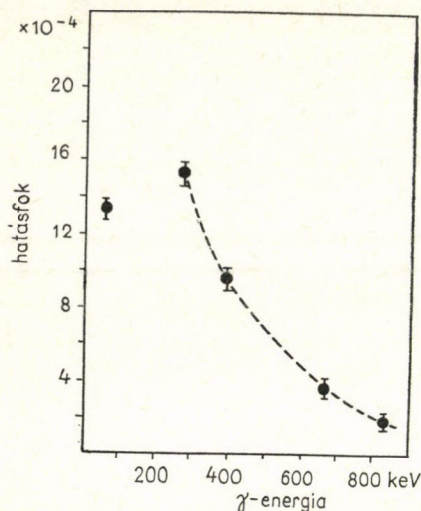
$$1 - \frac{Q}{1 - \sqrt{2}s \left(\frac{1}{d_x} + \frac{1}{d_y} \right)} = \frac{4b_2 \varepsilon}{1 + 2b_2 \varepsilon}$$

alakra egyszerűsödik. A két gerjesztett állapotra vonatkozó Q^{295} és Q^{357} mérésével ε és s meghatározható. Az elvégzett méréssorozat $\varepsilon=2,9(3)$ mrad és $s=0,0020(5)$ cm értékeket eredményezett, mely értékek kitűnően egyeznek *Varga László* számításaival. Mivel a céltárgy — detektor távolság mindkét detektorra ~ 5 cm volt, a nyalábeltolódás okozta változást, mint ezreléknyi nagyságrendűt elhanyagolhatjuk és a továbbiakban csak a 3 mrad-nyi nyalábelhajlást vesszük figyelembe.

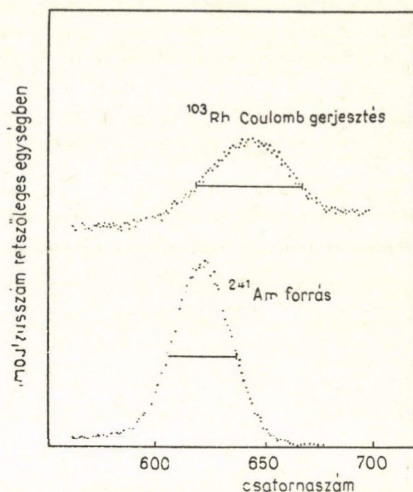
4.3.5. Az elágazási arány vizsgálata

A 3.4. fejezetben részletesen tárgyaltuk a ^{103}Rh 357 keV energiájú állapotának kaskád bomlásából eredő nehézségeket. A közbenső nem megfigyelt sugárzás hatásának pontos figyelembevételéhez a 357 keV állapotból származó 62 keV, illetve 357 keV energiájú γ -sugárzások intenzitás arányának ismerete szükséges. A 30 cm³-es detektorral méréssorozatot végeztünk az $\frac{I(62)}{I(357)}$ intenzitás arány meghatározására.

A „ Q^2 ” méréseknél megszokott erősítési viszonyokat úgy változtattuk meg, hogy az analízátor már ~ 30 keV-től kezdődően tárolja az impulzusokat. A spektrumból meghatározott intenzitás arányt először a detektor hatásfokának megfelelően kell módosítani. A detektor hatásfokának energiafüggését a 17. ábra mutatja. A hatásfok mérésénél sugárforrásként a bécsi Atomenergia Ügynökség (IAEA) hitelesített ^{241}Am , ^{203}Hg , ^{113}Sn , ^{137}Cs és ^{54}Mn forrásait használtuk, gondosan ügyelve arra, hogy a forrásdetektor geometria és az abszorbensek ugyanolyanok legyenek mint a Coulomb-gerjesztések során. A detektor 357 keV energiájú γ -sugárzásra vonatkozó hatásfokát a mérési pontokból grafikus interpolációval határoztuk meg, a 62 keV-re vonatkozót pedig a közel azonos energiájú ^{241}Am γ -sugárzására kapottal vettük egyenlőnek. (A hatásfok-görbe becslésünk szerint $\sim 10\%$ pontosságú.) Az I_{62}/I_{357} arányra eredményül 0,12(1) értéket kaptunk. *McGowan* és *Stelson* is mérték ezt az intenzitásarányt [38], eredményül 0,09(1)-t kaptak, amely a statisztikus hibán belül egyezik a



17. ábra. A 30 cm³ aktív térfogatú Ge(Li) detektor hatásfoka



18. ábra. A ¹⁰³Rh target és a ²⁴¹Au forrás spektrumának összehasonlítása

mi eredményünkkel. *Grunditz és munkatársai* a ¹⁰³Pd izotóp radioaktív bomlását vizsgálva 0,069(7) értéket kaptak ugyanerre az arányra [39]. Ez utóbbi pontos mérési eredmény eltér a Coulomb-gerjesztéssel mért két előbbi eredménytől. Az eltérés a következőképpen magyarázható. A 18. ábrán a Rh target Coulomb-gerjesztéskor felvett γ -spektrum 60 keV körüli kinagyított szakaszát mutatja az ²⁴¹Am forrással felvett spektrummal együtt. A vonalszélességek összehasonlításából látszik, hogy a Coulomb-gerjesztéses spektrum több egymáshoz közeli csúcs felbontatlan összege kell, hogy legyen, azaz a spektrumnak csak egy részét adja a minket érdeklő 62 keV energiájú sugárzás. A ~64 keV energiájú csúcs az Ir karakterisztikus K_{α} sugárzása lehet. A ródium és irídium kémiai rokon elemek, hiszen a periódusos rendszer azonos oszlopában foglalnak helyet, így a ródium target könnyen tartalmazhat irídiumot. A karakterisztikus röntgensugárzás keltésének hatás keresztmetszete viszont lényegesen nagyobb, mint a Coulomb-gerjesztésé, ezért egészen kicsiny mennyiségű irídium megzavarhatja az intenzitásarány mérést. Mivel *McGowan és Stelson* a miénkhez hasonló mérési feltételek mellett mértek, sőt detektoruk energiafelbontása lényegesen rosszabb volt, hiszen ők NaI(Tl) detektort használtak, ezért az Ir- K_{α} -sugárzás feltehetőleg az ő kiértékeléseiket is zavarta. Éppen ezért a további kiértékelésekben *Grunditz és munkatársai* eredményét használtuk.

5. Az eredmények diszkussziója

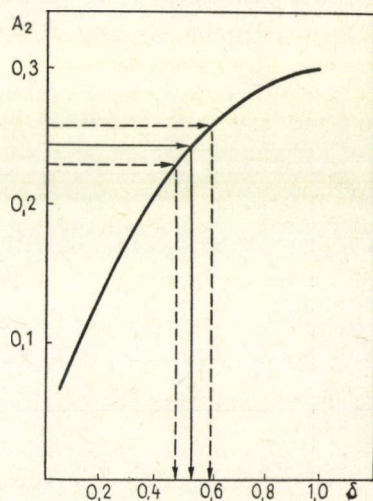
Az előző fejezetben az elsődleges, azaz közvetlenül mért mennyiségeket adtuk meg, a végső célként érdekes mágneses nyomaték, ill. belső mágneses tér értékeket ezekből az eredményekből kell leszámaztatnunk. Ezt a munkát ebben a fejezetben végezzük el, majd a kapott eredményeket értelmezzük és összehasonlítjuk más mérések eredményeivel.

5.1. A Fe—V mérések

A ^{51}V 320 keV energiájú γ -sugárzásának szögeloszlására kapott eredmények az I. táblázatban találhatók. A két különböző módon meghatározott b_2 , ill. a_2A_2 érték a statisztikus hibán belül kitűnően egyezik, éppen ezért átlagolhatjuk őket, az átlagolás $b_2=0,121(7)$ és $a_2A_2=0,168(10)$ értékeket eredményez. Miután az egyik mérés tiszta vanádium, a másik viszont 5 %-os Fe—V ötvözetből készült céltárggyal történt, a két mérési eredmény kitűnő egyezése igazolja a mágneseres mérések kiértékelésekor használt feltevésünket, nevezetesen azt, hogy a szögeloszlást megváltoztató perturbáció tisztán mágneses eredetű. Az A_2 mennyiség elméletileg is számítható, a szóbanforgó $7/2^- \xrightarrow{E2} 5/2^- \xrightarrow{M1+E2} 7/2^-$ átmenetekre az alábbi összefüggés írható fel [23]:

$$A_2^{\text{elm}} = \frac{0,0434 + 0,4507\delta + 0,1053\delta^2}{1 + \delta^2}.$$

A képletben szereplő δ az úgynevezett keverési paraméter, melynek négyzete az $E2$, illetve $M1$ típusú sugárzás intenzitásának arányát adja meg. Ha a képlet bal oldalába a kísérletileg mért A_2 együtthatót írjuk, az egyenletet δ -ra megoldva a keverési paraméterre kapunk kísérleti eredményt. Ahhoz, hogy A_2 mért értékét megkapjuk, az a_2 részecskeparaméter értékére is szükségünk van. Az [1] alatti dolgozat képleteinek és táblázatainak segítségével a részecskeparaméter értékére 0,69 adódik, ennek segítségével az A_2 szögkorrelációs együttható mért értékére 0,244(14)-t kapunk. Az I. táblázatból látható, hogy eredményünk kitűnően egyezik más, Coulomb-gerjesztéssel mért adatokkal. A szögeloszlások kiértékelésénél nem vettük figyelembe a detektorok véges térszöge okozta esetleges attenuációt, de az irodalmi adatokkal való kitűnő egyezés igazolja ezen elhanyagolás jogosságát. Az A_2 és δ közötti összefüggést a 19. ábra mutatja, a grafikon segítségével a keverési paraméterre $\delta=0,53(6)$ értéket kapunk eredményül, mely természetesen kitűnően egyezik a többi Coulomb-gerjesztéses mérés eredményével. Krause nem töltött részecskékkel való gerjesztéssel, hanem rezonancia fluoreszcencia segítségével vizsgálta a 320 keV energiájú állapotot, a keverési paraméterre 0,43(3)-t kapott eredményül [8]. A szögeloszlás mérések a keverési paraméter előjelét is megadják, míg abszolút értékének meghatározására mód nyílik, ha összehasonlítjuk a kérdéses állapot élettartamát a Coulomb-gerjesztéssel meghatározható $B(E2)$ redukált átmeneti valószínűséggel. Az így kapott abszolút értékek átlaga $|\delta|=0,47(3)$ jó egyezésben a mi eredményünkkel [40]. A szögeloszlási együttható tényleges értéke számunkra a mágneseres mérések kiértékelése szempontjából érdekes, az a tény viszont, hogy az általunk kapott értékek (A_2 , δ) jól egyeznek más irodalmi adatokkal, megnyugtató biztosíték a mérési elrendezés és kiértékelés használható voltára.



19. ábra. Az A_2 szögkorrelációs együttható és a keverési paraméter közötti összefüggés

A mágneseres mérések eredményei a II. táblázatban láthatók. A szögelfordulásokat a nyalábelterülés figyelembevételével a 4.3.4. pontban közölt képlet segítségével számítottuk a Q^2 értékekből. Mint azt a

$$g = -\frac{\omega\tau\hbar}{\mu_N B\tau}$$

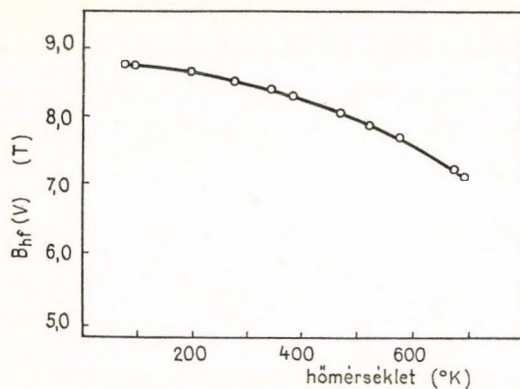
összefüggésből láthatjuk, a g -faktor és így a mágneses nyomaték kiszámításához a szögelforduláson kívül a kérdéses magállapot élettartamát és a mag helyén ható mágneses teret is ismernünk kell. A ^{51}V 320 keV energiájú állapotának élettartamát többben mérték különböző módszerrel; késleltetett koincidenencia-, rezonanciafluoreszcencia- és Coulomb-gerjesztéses módszerrel [8], [42]. A IV. táblázatban feltüntetettük a különböző élettartam értékeket. További számításainkhoz ezen értékek súlyozott átlagát, $\tau = 2,60(14) \cdot 10^{-10}$ sec élettartamot használunk.

IV. TÁBLÁZAT

A ^{51}V mag első gerjesztett állapotának kísérletileg kapott élettartam értékei

$\tau(10^{-10} \text{ s})$	Módszer	Hivatkozás
2,8(5)	késl. koinc.	ANL—6376, 1961
2,8(3)	"	Nucl. Data B3—5, 6—37
2,5(2)	"	Phys. Rev. 129(1963)1330
1,9(6)	rez. fluor.	Z. Phys. 144(1956)476
2,7(5)	"	Helv. Phys. Acta 34(1961)454
2,5(6)	"	Can. J. Phys. 40(1962)660
3,1(8)	"	ZSETF 36(1959)1586
3,6(8)	Coul. ex.	J. Phys. Rad 22(1961)692

A Fe—V ötvözetekben a vanádium atommagok helyén ható hiperfinom tér nagyságát is több kutatócsoport vizsgálta. A legpontosabb mérést Koi és munkatársai végezték magmágnesesrezonancia módszerrel [9]. Az 1 at % Fe—V ötvözzettel a hőmérséklet függvényében végzett méréseik eredményét a 20. ábrán láthatjuk. A 77 K hőmérsékleten mért tér érték $-8,73(3) \text{ T}$, azaz a külső mágnesező térrel ellentétes irányú.



20. ábra. A vanádium magokra ható belső tér hőmérsékletfüggése

Az 1 at %-os méréseink tehát közvetlenül kiértékelhetők ennek a belső mágneses tér értéknek a segítségével. A II. táblázatból viszont kitétni, hogy a mágneses kölcsönhatásra jellemző Q^2 mennyiségek a 0,5—5 at % koncentráció tartományban a mérési hibán belül megegyeznek. Méréseink szerint tehát a vanádium magokra ható belső tér ebben az összetétel tartományban állandó. Emiatt a mérési eredmény miatt a mágneses nyomaték meghatározását a következőképpen végezhetjük. A 0,5—5 at %-os ötvözetekre kapott Q^2 értékeket átlagoljuk, és az átlagból,

a mért b_2 szögeloszlási együttható segítségével kiszámítjuk a kérdéses tartományra jellemző szögelfordulást, melyre az

$$\overline{\omega\tau} = 0,161(10) \text{ rad.}$$

eredményt kapjuk. A mágneses nyomatékot pedig *Koi* és *munkatársai* által kapott belső tér segítségével határozzuk meg. Figyelembe kell azonban vennünk egyrészt a külső mágneses teret, mely ellentétes irányú a belsővel, így az utóbbiból le kell vonnunk, másrészt azt a körülményt, hogy céltárgyunk hőmérséklete nem pontosan cseppfolyós nitrogén hőmérséklet volt. A 20. ábrán jól látható, hogy a belső tér az alacsony hőmérsékletű tartományban alig változik, sőt szobahőmérsékletig is csak $\sim 2\%$ a csökkenés. Miután méréseink szerint [21] céltárgyunk hőmérséklete ~ 140 K, azaz bizonyosan jóval szobahőmérséklet alatti volt, a 77 K hőmérsékleten mért értéket használtuk, a hőmérséklet bizonytalanságot pedig a hiba 2%-osra növelésével vettük figyelembe, azaz $B = -8,58(17)$ T értékkel számoltunk. A ^{51}V első gerjesztett állapotának g -faktorára így $g = 1,50(14)$ értéket kaptunk. Ez az eredmény jóval pontosabb, mint az irodalomban található egyetlen korábbi mérés eredménye. *Krause* perturbált rezonancia-fluoreszcencia módszerrel $g = 1,69(29)$ eredményt kapott [8].

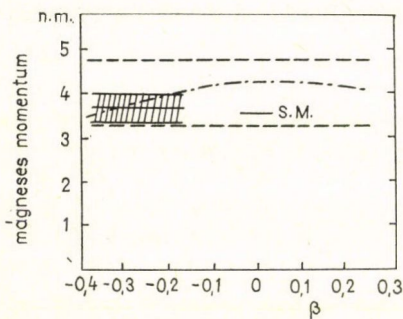
Pontosabb mérési eredményünk tovább erősíti azt az elképzelést, hogy a ^{51}V mag alacsonyan fekvő állapotai a zárt héjon kívül fekvő három proton $(7/2)^3$ konfigurációjának különböző állapotai. Mint azt már a 2.1. pontban említettük, e modell szerint a $(7/2)^3$ konfiguráció összes állapotának azonos g -faktora kell, hogy legyen. Az alapállapot g -faktora $1,4708(4)$ [7], mely érték kitűnően egyezik az általunk kapott eredménnyel.

Meg kell még említenünk, hogy mérési eredményünk összhangba hozható egy egészen más modell számításaival is. Nevezetesen *Scholz* és *Malik* az 50-es tömegszám környékén levő magokra alkalmazta *Bohr* és *Mottelson* erős csatolású kollektív modelljét [43]. Axiálszimmetrikusan deformált törzset feltételezve a

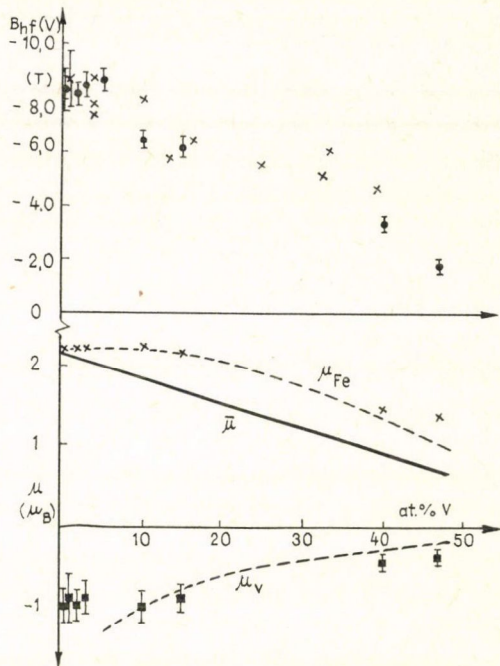
$$H = \frac{\hbar^2}{\mathcal{J}} (I^2 + J^2 - 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})) + H_p$$

Hamilton operátort diagonalizálták, ahol \mathbf{j} a részecske, \mathbf{I} pedig a mag teljes impulzusmomentuma, H_p a törzs terében mozgó részecske Hamilton operátora, \mathcal{J} a törzs tehetetlenségi nyomatéka; a számítás során az $\mathbf{I} \cdot \mathbf{j}$ Coriolis-tagot nem perturbációként kezelték, éppen ezért nevezik a modellt erős csatolásúnak. A β deformációs paramétert szabadon hagyták és értékét a kísérleti energiaspektrumhoz való illesztésből határozták meg. A számítás két β értéket valószínűsített, a $\beta = -0,32$ és $\beta = 0,20$ értékeket. A negatív deformációs paraméter feltételezésével számított g -faktor egyezik az általunk kapott eredménnyel (lásd 21. ábra). A modell ellen számos komoly ellenvetés tehető [41], itt csak azt említjük meg, hogy az általunk vizsgált $5/2^-$ állapotot a kísérletileg talált 320 keV energia helyett ~ 700 keV energiájának számítja és a feljebb levő $11/2^-$ és $9/2^-$ állapotokat a ténylegessel ellentétes sorrendben adja. Éppen ezért az az álláspontunk, hogy mérési eredményünk a $(7/2)^3$ héjmodell konfigurációt támasztja alá, annál is inkább, mivel *Bhattacharjee* a *de Shalit* professzor emlékének szentelt dolgozatában [5], *de Shalit* és *Feshbach* pedig a „Theoretical Nuclear Physics” című könyvükben éppen a mi eredményünkkel illusztrálják a $(7/2)^3$ konfiguráció használhatóságát [6].

A továbbiakban fordítsuk figyelmünket másik kitűzött feladatunkra, a hiperfinom kölcsönhatás nagyságának a Fe—V ötvözesi aránytól való függésére. Mivel a gerjesztett magállapot mágneses nyomatéka nem függ ettől az aránytól, a kölcsönhatás változása a belső mágneses tér változását tükrözi. A 22. ábra felső részén kitöl-



21. ábra. A ^{51}V 320 keV-es nivójának mágneses nyomatéka a β deformációs paraméter függvényében [43]. A bevonalkázott sáv ezen munka eredményét, a két szaggatott vonal a korábbi mérés hibahatárait, míg S. M. a héjmodell számítás eredményét jelzi



22. ábra. A vanádium atommagokra ható belső mágneses tér, illetve a vanádium és vas atomok átlagos lokalizált momentumának koncentrációfüggése. (A hibájukkal együtt feltüntetett pontok a dolgozat eredményei, a keresztek irodalmi adatok, a szaggatott görbék Kajzar elméleti számításai [45])

tött körökkel tüntettük fel az általunk mért hiperfinom tér értékeket. A mérési pontokat úgy normáltuk, hogy az 1 at %-os vanádiumot tartalmazó ötvözetben mért $B_{hf}(V)$ hiperfinom tér érték egyezzen meg a *Koi* és *munkatársai* által meghatározottal. Az ábrán keresztekkel jelöltük az irodalomban talált mérési eredményeket [44], melyeket NMR technikával, illetve a nukleáris fajhő mérésének módszerével kaptak. Bár a legtöbb irodalmi adat hibáját nem közölték, megállapíthatjuk, hogy az alacsony vanádium tartalmú ($C \leq 15$ at %) ötvözetekre kapott eredmények jól egyeznek egymással, 40 és 47 at %-os méréseink eredményei viszont nem igazolják a korábban kapott viszonylag nagy (abszolút értékben) értékeket.

Legújabbán *Kajzar* végzett elméleti számításokat a Fe—V rendszeren az úgynevezett koherens potenciál közelítésben [45]. Számításainak fő célja a vanádium atomokon talált negatív mágneses momentum [46] magyarázata volt. Számításainak

eredményét a 22. ábra alsó felén szaggatott vonal mutatja. Vizsgáljuk meg, hogy hiperfinom tér méréseink eredményei milyen kapcsolatba hozhatók ezekkel a számításokkal!

A 3.5. pontban tárgyalt

$$B_{hf}(V) = a\mu_V + b\bar{\mu}$$

fenomenológikus összefüggés segítségével meghatározhatjuk a vanádium atomokon levő mágneses momentum értékét. Az ötvözet átlagmágnesezettségét, azaz $\bar{\mu}$ -t Aldred mérte meg nagy pontossággal [47], μ_V kiszámításához ezenkívül még a két állandó, a és b értékének ismerete szükséges. A kísérleti tapasztalatok szerint a értéke egy adott átmeneti fém csoporton belül jó közelítésben állandó, a $3d$ csoportra elfogadható az $a = -5 \text{ T}/\mu_B$ érték [26]. A másik állandó, b értékét viszont úgy választottuk, hogy megkívántuk, hogy az 1 at %-os ötvözetre kapott μ_V vanádium momentum egyezzen meg a Collins és Low által mért $-0,9\mu_B$ értékkel [46]. Ily módon b -re $6,1 \text{ T}/\mu_B$ értéket kaptunk. A 22. ábrán négyzetekkel ábrázoltuk a fenti állandókkal és Aldred mágnesezettségi adataival számolt mágneses momentumokat. Bár a kísérleti eredmények hibája meglehetősen nagy, a koncentrációfüggés menete egyezik az elméleti jóslással, kivéve a kis vanádium koncentrációk tartományát (az elmélet erre a tartományra irreális növekedést jósol). A koncentrációfüggés jellege érzéketlen a b állandó megválasztására, b értékének ésszerű határok közötti változtatása nem okoz lényeges változást, csupán az abszolút értékek változnak, ezt pedig a kísérleti adatok pontatlansága megengedi. Meg kell jegyeznünk, hogy az általunk mért B_{hf} értékek összeférnek az a állandó zérus értékével is, azaz a $B_{hf}(V) = b\bar{\mu}$ összefüggéssel (b értéke ekkor $4 \text{ T}/\mu_B$ -nak adódik), ez a választás viszont ellentmond a kísérleti és elméleti úton kapott hiperfinom tér szisztematikákkal [14]. Mössbauer mérések segítségével ugyanezekben a mintákban meghatároztuk a vas atommagok helyén ható $B_{hf}(\text{Fe})$ hiperfinom teret is [48], a vanádiumhoz hasonló módon számított μ_{Fe} értékeket is feltüntettük a 22. ábrán Kajzar számított görbéjével együtt. A 47 %-os ötvözetben mért értéktől eltekintve kitűnő az egyezés az elmélet és kísérlet között. Sem az elméleti modell, sem pedig mérési eredményeink nem igazolják viszont Aldred következtetését, mely szerint a 0–6 at % vanádium koncentráció tartományban a kezdeti $-0,5\mu_B$ értékű vanádium momentum $-1,0$ Bohr magnetonra változik [47]. Kis vanádiumkoncentrációjú ötvözetek további vizsgálatára lenne szükség, hogy a mérési hiba leszorításával a pontosabb koncentrációfüggést meghatározhassuk.

5.2. A Fe—Rh mérések

A vanádium mérésekhez hasonlóan először most is a mágneses nyomatékokra vonatkozó eredményeket tárgyaljuk. A mágneses nyomatékok kiszámításához ismerünk kell a belső mágneses tér nagyságát. *M. Kontani* és *munkatársai* nagy pontossággal híg Fe—Rh ötvözetekben mérték meg a belső teret NMR módszerrel [15], éppen ezért a mágneses nyomatékokat a 3 at % ródium tartalmú ötvözzel végzett mérésekből határoztuk meg feltételezve az előbbi szerzők által mért $-54,0(5) \text{ T}$ nagyságú belső teret.

Először foglalkozzunk az $5/2^-$ spinű és paritású 357 keV energiájú állapot mágneses nyomatékával. Ezen állapot lebomlásával kapcsolatos szögeloszlási együttható értéke az I. táblázatból olvashatóan $b_2 = 0,1673(15)$. A részecskeparaméter segítségével meghatározott kísérleti A_2 érték kitűnően egyezik az erre az $1/2^- \xrightarrow{E_2} 5/2^- \xrightarrow{E_2} 1/2^-$

tiszta átmenetre számítható elméleti értékkel. Ez az egyezés ismét megerősíti egyrészt a mérési elrendezés megbízhatóságát, másrészt a térszőgkorrekció elhanyagolhatóságát.

A 3%-os ötvözzel végzett mágnesteres mérési sorozatok $Q^2=1,146(5)$ eredményt adtak. A 4.3.4. pontban tárgyalt nyalábeltérülés figyelembevételével, amely ebben az esetben Q^2 meglehetősen nagy értéke miatt nem jelent lényeges módosítást, a szögelfordulás értékére $\omega\tau_{357}=0,121(5)$ radianst kapunk. A g -faktor meghatározásához még a gerjesztett állapot élettartamának ismerete is szükséges. Ezt az élettartamot két, egymástól lényegesen különböző módon mérték meg. A [38], [49] és [50] alatti munkákban az állapot Coulomb-gerjesztésének hatáskeresztmetszetét mérve az átmenetre jellemző $B(E2)$ redukált átmeneti valószínűséget kapták meg és ebből számították az élettartamot. A redukált átmeneti valószínűségeket az V. táblázatban foglaltuk össze. A Coulomb-gerjesztéskor létrejött 357 keV energiájú állapotok részben a 295 keV-es állapotra is bomlanak, ezért a $B(E2)$ mennyiség kiszámításakor a kaszkád bomlás/alapállapotra bomlás arányt is figyelembe kell venni. Az idézett szerzők ezt az arányt 0,19-nek vették, a [41] alatti munka pontosabb

V. TÁBLÁZAT

A 357 keV energiájú nívóra vonatkozó redukált mátrixelem kísérleti értékei

$B(E2) \dagger \times 10^{49} \text{ cm}^4$	Hivatkozás
3,93 (28)	3,83 (27) ^a [38]
3,78 (27)	3,68 (26) ^a [49]
3,92 (27)	3,82 (27) ^a [50]

^aA pontosabb kaszkád alapállapot hányadossal korrigált értékek.

mérései viszont 0,16-t adnak. Ezzel az új aránnyal átszámoltuk a redukált átmeneti valószínűségeket és az átszámolt értékeket az V. táblázat második oszlopában tüntettük fel. A közel azonos mérési hibák miatt az eredmények egyszerűen átlagolhatók, az átlag $3,78 \cdot 10^{-49} \text{ cm}^4$ nagyságú $B(E2)$ -t ad. Az elérhető legpontosabb totális konverziós együttható ($\alpha_{357}=0,0155$ [55]) segítségével ebből az értékből $\tau_{357}=95(4)$ psec élettartamot kapunk.

Miller és Takeda [56] a nehéz ionokkal végzett Coulomb-gerjesztéskor meglökött magok által kibocsátott γ -sugarak energiájának

Doppler-eltolódását mérve 112(10) psec élettartamot kapott. A két eredmény átlaga 99(4) psec, ezzel az élettartammal a ^{103}Rh 357 keV energiájú gerjesztett állapotának g -faktorára

$$g_{357} = 0,49(3)$$

érték adódik. Mérési eredményünket a dublett másik, 295 keV energiájú tagjának g -faktorával együtt hasonlítjuk majd össze más mérések és az elméleti számítások eredményével.

A szóban forgó 295 keV energiájú állapot megbeszélése a 3.4. pontban részletesen tárgyalt közbenső sugárzás fellépte miatt bonyolultabb feladat.

A szögeloszlás eredménye, $b_2^{\text{mért}} = -0,2024(21)$, $a_2 A_2^{\text{mért}} = -0,253(3)$, a közvetett és közvetlen gerjesztésű sugárzások eredőjére vonatkozik. Magára a 295 keV energiájú $3/2^- \xrightarrow{M1+E2} 1/2^-$ átmenetre viszont a közvetlen együtthatók, A_2^d , illetve b_2^d jellemzők. A 3.4. fejezet Coulomb-gerjesztésre vonatkozó szögeloszlásfüggvényéből könnyen megkaphatjuk az $a_2 A_2^{\text{mért}}$ és az A_2^d együtthatók közötti összefüggést:

$$a_2^d A_2^d = \frac{(a_2 A_2)^{\text{mért}}}{\left[\alpha + \frac{4}{5} \frac{a_2^d}{a_2^i} \beta \right]},$$

Az a_2^d és a_2^i részecskeparaméterek tényleges értékei miatt (az I. táblázat szerint 0,72, illetve 0,81) a nevező α és β értékeitől alig függő egyhez közeli érték. (Ismételten megjegyezzük, hogy α és β a kétféle sugárzás relatív hányadát jelölik, így összegük mindig egy.) Ennek ellenére célszerű α és β pontos értékét megállapítanunk, a g -faktor kiszámításánál úgyis szükségünk lesz rá.

A 4.3.5. pontban mondottak szerint a közvetett, tehát a 357 keV-es állapot bomlásából származó 295 keV energiájú γ -sugarak relatív számának meghatározásához a 62 keV-es közbenső sugárzás és a 357 keV-es sugárzás intenzitás arányát használjuk és számszerű értéknek az $I_\gamma(62)/I_\gamma(357)=0,069(7)$ értéket fogadjuk el [39]. A K , L és M héjakon történő belső konverziót figyelembe vevő totális konverziós együtthatók segítségével, melyek értékei $\alpha_{357}^T=0,0155$ és $\alpha_{62}^T=1,34$ [51], ez az intenzitás arány azt jelenti, hogy a 357 keV-es állapotok 86%-a közvetlenül az alapállapotba, 14% pedig a 297 keV-es állapottra bomlik. Ha még azt is figyelembe vesszük, hogy az [1] alatti dolgozat „vastag target hozam” képletével számolva 1,41-szer több 357 keV-es állapot keletkezik a Coulomb-gerjesztés során mint 295 keV-es, az $\alpha=0,84$ és $\beta=0,16$ értékeket kapjuk. Ezeket az értékeket használva a közvetlen szögkorrelációs együtthatóra az $A_2^d = -0,357(4)$ érték adódik. Ez az eredmény az I. táblázat tanúsága szerint jól egyezik az irodalomban talált adattal [50] és így természetesen a keverési paraméterre is az irodalomhoz hasonló $\delta = -0,14$ értéket ad.

α és β lényegesen fontosabb szerepet játszik a szögelfordulás kiértékelésében. A mért Q^2 mennyiségből most a nyalábeltérülés figyelembevétele mellett az elágazás hatását is tartalmazó összefüggés segítségével számíthatjuk ki a szögelfordulást. Ha a közbenső átmenetet is tartalmazó perturbált szögeloszlásfüggvényt behelyettesítjük a „ Q^2 ” definíciós képletébe és a θ szögnek a tényleges mérési szöget vesszük, átalakítások sora után a következő összefüggést kapjuk:

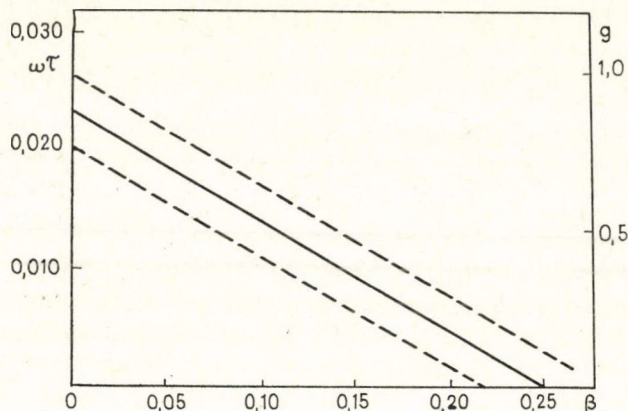
$$Q = \frac{1 - \frac{\alpha b_2^d(x-2\varepsilon)}{1+x^2} - \frac{\beta b_2^i(x+y-2\varepsilon(1-xy))}{(1+x^2)(1+y^2)}}{1 + \frac{\alpha b_2^d(x-2\varepsilon)}{1+x^2} + \frac{\beta b_2^i(x+y-2\varepsilon(1-xy))}{(1+x^2)(1+y^2)}},$$

ahol $x=2\omega\tau_{295}$ és $y=2\omega\tau_{357}$, α , β , b_2^d , b_2^i és ε már korábban definiált mennyiségek.

Az egyenletet az α és β paraméterek különböző értékeire TPA kisszámítógépre írt FOKAL program segítségével oldottuk meg az x mennyiségre, mely a keresett szögelfordulás kétszerese. A 23. ábrán ezt a szögelfordulást láthatjuk a β paraméter függvényében. Az ábra jobb oldalán a „ g -faktor skálát” tüntettük fel, mely az állapot élettartama segítségével számítható. Az irodalmi adatokból, [38], [49], [50], [52], a 357 keV-es állapot esetében követett módon 7,4(3) psec élettartamot határoztunk meg.

Az $\omega\tau$ és g -faktor eredményeinket a VI. táblázatban tüntettük fel az irodalomban található kísérleti és elméleti eredményekkel együtt. Az [53] munkából idézett adatok kivételével a többi eredetileg közölt adatot az általunk használt élettartam értékekkel átértékeljük. Az [53] dolgozat nem közölt elegendő adatot az átszámítás elvégzéséhez.

Hasonlítsuk össze először a kísérleti eredményeket! A 357 keV-es állapot kísérleti g -faktorai a mérési hibákon belül jól egyeznek egymással. A jelen dolgozat eredménye kiemelkedően a legpontosabb, amit az a tény is jelez, hogy a Nuclear Data Sheets is ezt az értéket fogadja el [54]. A ^{103}Rh 357 keV-es gerjesztett állapotá-



23. ábra. A ^{103}Rh 295 keV energiájú állapotára vonatkozó $\omega\tau$ és g -faktor a β paraméter függvényében. (A β definícióját lásd a szövegben.)

VI. TÁBLÁZAT

$\omega\tau$ és g -faktor értékeink összehasonlítása más kísérleti és elméleti eredményekkel

	a	b	c	d	e	saját mérés		f	g
						$\beta=0$	$\beta=0,16$		
$\omega\tau_{295}$	0,029(7)	0,004(5)				0,023(3)	0,0070(36)		$g_s=4,36$ $g_s=1,4$
g_{295}	1,51(40)	0,02(26)	0,90(22)	0,92(27)	1,55(35)	1,20(16)	0,36(20)	0,55	1,32 0,57
$\omega\tau_{357}$	0,108(14)	0,103(7)					0,121(5)		
g_{357}	0,44(8)	0,42(8)	0,52(12)	0,44(15)	0,52 (8)		0,49 (3)	0,31	0,20 0,54

a) Bhattacharjee és munkatársai [16]

b) Roney és munkatársai [17]

c) Sprouse és munkatársai [18]

d) Miller és munkatársai [56]

e) Heusinger és munkatársai [53]

f) a [10] alatti munka alapján számolt értékek

g) Bargholtz [57]

nak g -faktora, illetve mágneses nyomatéka tehát:

$$g_{357} = +0,49(3), \quad \mu_{357} = \frac{5}{2} \cdot g_{357} = 1,23(8)\mu_N$$

feltéve, hogy az állapot élettartama 99(4) psec.

A 295 keV energiájú állapot esetében már nem ilyen tiszta a helyzet. Feltűnően kiugrik Roney és munkatársainak eredménye, mely zérus mágneses nyomatékot jelent. A dolgozatot áttanulmányozva az derül ki, hogy a mérés során fellépő transziens mágneses tér okozta impulzusszerű elfordulás, mely a mérni kívánt szögelfordulással éppen ellentétes irányú volt, okozta a hibán belül zérus eredő elfordulást. Hangsúlyoznunk kell, hogy az irodalomban rajtunk kívül senki nem vette figyelembe ennél az állapotnál a kaszkád bomlások hatását [54], [55], így eredményeiket a mi $\beta=0$ értéknek megfelelő eredményünkkel vethetjük össze. Megállapíthatjuk, hogy a mérési hibákon belül ezek az eredmények is egyeznek; hozzáátve, hogy a sokkal ki-

sebb szögelfordulások miatt a hibák most nagyobbak. A legpontosabb most is a mi eredményünk. Érdemes megjegyezni, hogy *Sprouse* és *munkatársai*, ill. *Miller* és *munkatársai* által kapott g -faktorok észrevehetően kisebbek. Mindkét csoport nagy energiájú nehéz ionokkal gerjesztette az érdekelt magállapotokat, a meglökött magok kiléptek a vékony targetből és a szórókamra gázterében repültek tovább („recoil-into-gas” módszer). A magokra ható hiperfinom kölcsönhatás meghatározása meglehetősen bonyolult, elméletileg nem teljesen tisztázott feladat, éppen ezért ismert g -faktorú páros-páros magokkal végzett mérésekkel határozták meg a tényleges perturbációt. Ezeknek a „standard” állapotoknak viszont lényegesen hosszabb az élettartamuk, mint a vizsgálni kívánt 295 keV energiájú ródiom állapotnak, és valószínűleg ez az oka, hogy a hosszabb élettartamú 357 keV energiájú állapottal szemben méréseik eredménye eltér a más módszerrel kapott eredményektől.

A mérési adatok egyezése azt bizonyítja, hogy a különféle kísérleti módszerek egyaránt alkalmasak a hiperfinom kölcsönhatás okozta perturbáció pontos megméréseire. A mágneses nyomaték értékét viszont csak a közbenső sugárzás gondos figyelembevételével kaphatjuk meg. A valódi g -faktort a kísérletileg talált β segítségével határozhatjuk meg.

$$g_{295} = +0,36(20), \quad \mu_{295} = \frac{3}{2} \cdot g_{295} = 0,54(30)\mu_N$$

feltéve, hogy az állapot élettartama 7,4(3) psec. A 23. ábrán jól látható, hogy már egészen kevés indirekt sugárzás jelenléte esetén a mért szögelfordulásnak csak kis része származik a közvetlen gerjesztésű állapot lebomlása szögeloszlásának elfordulásából, ez szemléletesen azzal magyarázható, hogy a felső állapot élettartama körülbelül egy nagyságrenddel hosszabb, és így az állapotnak „elég ideje van elfordulni” mielőtt a közbenső állapotra bomlana. A Nuclear Data Sheets most nem egyedül a mi eredményünket fogadta el, hanem átlagolta az általunk is idézett [56] alatti dolgozat eredményével. Ennek az eljárásnak az lehetett az oka, hogy *Miller* és *munkatársai* dolgozatukban $g=0,47(14)$ értéket közöltek, mely hibán belül tényleg egyezik a mi eredményünkkel, így az átlagolás jogosnak látszik. Az átlagolás azonban ennek ellenére két okból nem végezhető el. Egyrészt az említett szerzők nem vették figyelembe a közbenső sugárzást, másrészt kétszer akkora élettartamot tételeztek fel számításaik során, mint az elfogadott élettartam. (A VI. táblázatban a helyes élettartamra átszámolt értéket tüntettük fel, mely természetesen már lényegesen eltér eredményünkől, így az átlagolás gondolata fel sem merül.)

Eredményeink birtokában fontos megállapítást tehetünk a tranziens mágneses tér felléptének vizsgálatával kapcsolatban is. *Cameron* és *munkatársai* [19], *Heusinger* és *munkatársai* [53], ill. a mi munkacsoportunk egy további munkájában [11] éppen ezért választotta a ^{103}Rh szóban forgó dublettjét vizsgálata tárgyává, mert a két állapot élettartama közötti nagyságrendnyi különbség kitűnő alkalmat kínált a tranziens tér tanulmányozásához. A tranziens tér ugyanis alig befolyásolta volna a hosszú élettartamú állapotra vonatkozó mérést, míg igen lényeges szerepet látszott játszani a rövid élettartamú állapot esetében. Jelen pontosabb analízisünk szerint viszont ez a dublett nem alkalmas a tranziens tér vizsgálatára. Mint kimutattuk, a rövid élettartamú állapot perturbációjának nagy része a kaszkád bomlásból származó közvetett γ -sugárzás által „örökölt” perturbációból ered. A közvetett sugárzás pedig, bár magának a közbenső 295 keV-es állapotnak valóban nagyon rövid az élettartama, az

esetleges tranziens térből semmit sem érezhet, mivel a csaknem száz psec élettartamú 357 keV-es állapot elbomlása után keletkezik csak.

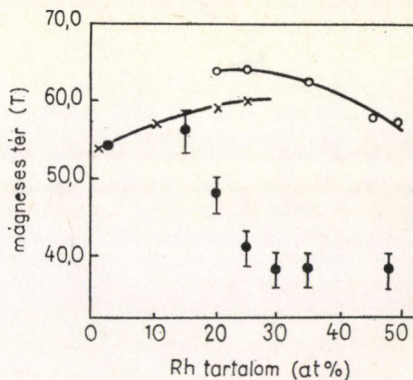
A VI. táblázat elméleti eredményeket is tartalmaz. Az első oszlop a 2.2. pontban részletesen tárgyalt gyenge csatolásos törzsgerjesztéses modell segítségével számolt g -faktor értékeket mutatja. A számításhoz a két szomszédos páros-páros mag első 2^+ kvantumszámú gerjesztett állapota g -faktorának átlagát, $g_c = 0,43(1)$, használtuk törzs g -faktoraként, míg a páratlan részecskét a ^{103}Rh alapállapotának mért mágneses nyomatékából számítható $g_p = -0,176$ g -faktossal jellemeztük. A modell nem tudja kielégítően magyarázni a kísérleti tapasztalatot. Egyrészt szignifikánsan kisebb értéket ad a meglehetősen pontosan megmért g_{357} mennyiségre, másrészt a tapasztalattal ellentétben a $3/2^-$ spinű állapotnak majdnem kétszer akkora g -faktort tulajdonít. A leírás elégtelenségének valószínűleg az az oka, hogy a $3/2^-$ állapot nem teljesen tiszta, a $|2p_{1/2}3/2\rangle$ állapothoz kis mértékben keveredik például a $|0p_{3/2}3/2\rangle$ állapot is. Ezt a feltevést támasztja alá az is, hogy a törzsgerjesztéses modellel ellentétben a $3/2 \rightarrow 1/2$ átmenet nem tiszta $E2$ típusú átmenet, hanem lényeges $M1$ típusú összetevője is van.

Az elméleti eredmények második és harmadik oszlopa *Bargholtz* számításainak eredményét tartalmazza, aki az egyesített modell keretében végezte számításait közepes erősségű csatolás feltételezésével [57]. A modell alap gondolata azonos a *de Shalit* féle törzsgerjesztéses modellel, amennyiben az utolsó páratlan részecskét tekintik csak különállónak, mely a többi nukleon alkotta törzs potenciál terében mozog. A rendszer Hamilton operátorát olyan bázisrendszerben diagonalizálta, melyben három fononos vibrációs törzsállapotok is előfordultak, míg a proton kvázirészecskék számára a $p_{1/2}$, $p_{3/2}$ és $f_{5/2}$ állapotok voltak elérhetőek. A törzsvibráció $\hbar\omega_2$ energiakvantumát, a csatolás ξ erősségét, valamint az $E_{3/2^-}$ és $E_{5/2^-}$ kvázirészecske energiákat szabad paraméterekként kezelve illesztette a modell szolgáltatja energiákat a kísérletileg talált spektrumhoz. A mágneses nyomaték számításakor a törzs g -faktorát $g_c = Z/A$ értékűnek tétélezte fel és a g_s spin g -faktort változtatta úgy, hogy a számítás legjobban illeszkedjék a kísérleti alapállapoti g -faktorhoz. A legjobb illeszkedés $g_s = 4,36$ értéknél kapta. Miután a gerjesztett állapotra kapott g -faktorok egyáltalában nem egyeztek a kísérlettel, számításokat végzett egész más $g_s = 1,4$ spin g -faktossal is, és ekkor már jobb egyezést kapott. Az a tény, hogy a spin g -faktor értéke ilyen drasztikusan befolyásolja a mágneses nyomaték számított értékeit, azzal van összefüggésben, hogy a modell semmi más dipol polarizációt nem vesz figyelembe azon kívül, hogy a szabad spin g -faktora helyett ($g_s^{\text{szabad}} = 5,587$) effektív g -faktort használ [57]. Az elmélettel való összehasonlítást azzal a következtetéssel zárhatjuk, hogy olyan elméleti számítás, mely az energiaspektrum mellett az elektromágneses tulajdonságokat, főként pedig a mágneses nyomatékokat kielégítő egyezésben adná a tapasztalattal, jelenleg nem áll rendelkezésre. Ezen a területen tehát további elméleti munkára van szükség.

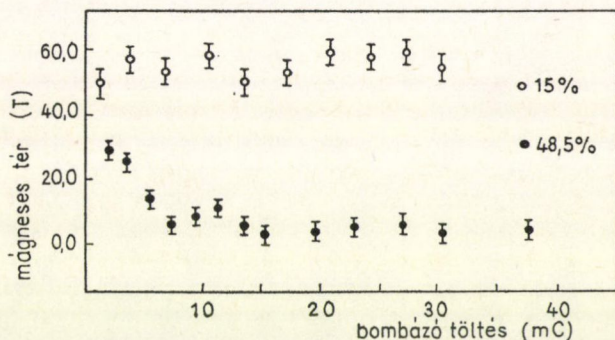
Befejezésül értelmezzük a különböző összetételű ötvözetekkel végzett mérések eredményeit! Mivel a 357 keV energiájú állapotra vonatkozó Q^2 értékek jóval pontosabbak, a továbbiakban csak ezekre a mérési adatokra támaszkodunk. A 24. ábrán a kitöltött körök mérési eredményeinket, a keresztek és üres körök *Kontani* és *munkatársai* [15] eredményeit mutatják. Eredményeinket úgy normáltuk, hogy a 3 at% ródiomot tartalmazó ötvözetre vonatkozó belső mágneses teret a [15] alatti munka $-54,0(8)$ T nagyságú mágneses terével tettük egyenlővé. Mielőtt a két mérés közötti lényeges eltérés magyarázatát adnánk, ki kell emelnünk a 48,5 at% ródiomot tar-

talmazó ötvözetre vonatkozó adatok különös viselkedését. Méréseink során azt tapasztaltuk, hogy a Q^2 mennyiség értéke mindig kisebbnek adódott, ha hosszabb volt a mérési idő, azaz feltehetően a mérési idő (és ennek megfelelően a mintát ért bombázó protonok számának) növekedtével a belső mágneses tér csökkent. A jelenség ellenőrzésére mérés-sorozatot végeztünk, mely egymást követő néhány perces mérések sorozatát jelentette. A 25. ábra. mutatja ezeknek a méréseknek az eredményeit. Az ábráról látható, hogy az állandó nagyságú belső teret mutató 15 at%-os ötvözzel szemben a 48,5 at%-os ötvözetre vonatkozó belső tér értékek $\sim 3,5$ mC „felezési dózissal” csökkennek. A 24. ábrán a zérus bombázó töltésre extrapolált mágneses tér értéket tüntettük fel.

Mind a Kontani féle értékektől való 35–40%-os eltérés, mind pedig a fenti „feleződési” effektus kvalitatíve magyarázható speciális sugárzási károsodás feltételezésével.

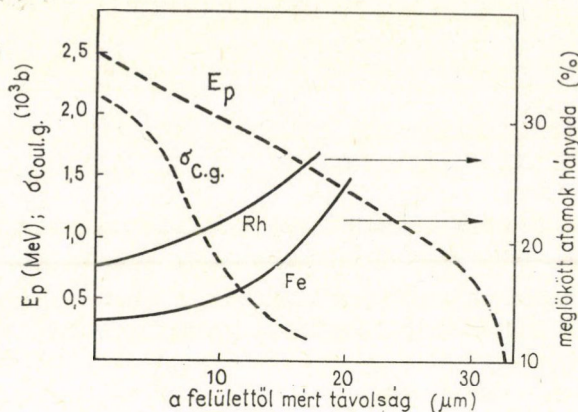


24. ábra. A ródium atommagokra ható belső mágneses tér koncentrációfüggése



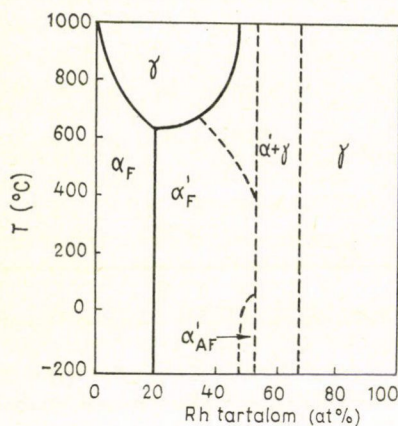
25. ábra. A hiperfinom tér dózisfüggése

A protonokkal való bombázásnak többféle hatása lehet. Először is lokálisan felmelegíti a mintát. Pusztán a felmelegítés nem okozhatja az effektust, hiszen a makroszkópikus termikus egyensúly sokkal gyorsabban bekövetkezik, minthogy a $\sim 3,5$ mC töltés beérkezne. A bombázás másik következménye, hogy hidrogén-gazdag réteg jön létre a mintában. A 26. ábrán feltüntettük a 2,5 MeV kezdeti energiájú protonok maradék energiáját a behatolási mélység függvényében. Láthatjuk, hogy a protonok 35 μm mélyen állnak meg, azaz ilyen mélységben jön létre a hidrogén feldúsulás. A Coulomb-gerjesztés hatáskeretszámításának protonenergiafüggéséből viszont kitűnik, hogy a gerjesztések zöme a minta első 10 μm vastag rétegében történik, a hidrogén feldúsulás tehát nem tehető felelőssé a tér lecsökkenéséért. Ha viszont azt vizsgáljuk, hogy ebben az első rétegben milyen mértékű mozgás, átrendeződés történik a bombázás hatására, megállapíthatjuk, hogy a domináns Rutherford-szórás következtében az ötvözet atomjai kilökődnek eredeti helyükről. (A visszalökődési energia



26. ábra. A görbék magyarázatát lásd a szövegben

~170 keV a vas, és ~100 keV a ródium atomokra, míg egy atom kimozdításához ~20 eV energia szükséges [58].) A 26. ábrán azt is feltüntettük, hogy 3 mC proton-dózis hatására az ötvözetet alkotó atomok hány százaléka löködött ki eredeti helyéről.



27. ábra. A Fe—Rh ötvözetek fázisdiagramja

Láthatjuk, hogy az első 10 μm-es rétegben az atomok 15—20%-a löködik ki. Mint azt már korábban hangsúlyoztuk, a kísérleti tapasztalatok azt mutatják, hogy a Rutherford-szórás fenti hatása általában nem okoz változást a hiperfinom térben, az általunk talált eltéréseket a Fe—Rh ötvözetek fázisdiagramjának segítségével próbáljuk magyarázni [59].

A bombázó részecske pályája végén 10^4 — 10^5 atom részvételével hőmérsékleti „spike” jön létre [58], melynek következtében igen rövid időre a hőmérséklet lokálisan néhány ezer fokra is felszökhet. A fázisdiagram szerint a 20 at% Rh tartalom feletti tartományban 600 K feletti hőmérsékleten nemmágneses γ -fázis jelenik meg (lásd 27. ábra). Feltevésünk szerint ez a fázis a lehűlés folyamán részlegesen befagy, azaz a hőmérséklet „spike” a mágneses α és

nemmágneses γ -fázis keverékét hozza létre, mely az átlagos belső tér csökkenéséhez vezet.

A 48,5 at %-os ötvözetnél talált dóziszfüggés magyarázatára a következőket mondhatjuk. Ez a koncentráció igen közel van a kritikus 50 at% Rh koncentrációhoz, amely felett a γ -fázis fellépte még a leggondosabb hőkezelés mellett is elkerülhetetlen. Azt hisszük tehát, hogy a Rutherford-szórás okozta hőmérsékleti spike hatására az ötvözet zöme a nemmágneses γ -fázisba transzformálódik. A jelenség pontosabb megértéséhez további kísérleti vizsgálatokra van szükség.

6. Összefoglalás

Perturbált szögeloszlásméréseket végeztünk különböző összetételű **Fe-V** és **Fe-Rh** ötvözetekből készült céltárgyakkal. 2,5 MeV energiájú protonokkal Coulomb-gerjesztettük a ^{51}V izotóp 320 keV energiájú, a ^{103}Rh mag 295 és 357 keV energiájú állapotait. Ezen rövid élettartamú állapotok lebomlásakor keletkező γ -sugárzás szögeloszlását az ötvözetekben fellépő hiperfinom mágneses tér perturbálta. A perturbáció kimérésével meghatároztuk a fenti gerjesztett állapotok mágneses nyomatékát: A ^{51}V első gerjesztett állapotának g -faktorára kapott, az egyetlen korábbi mérésnél jóval pontosabb érték összhangban van ezen nívó $(7/2)^3$ konfigurációt feltételező elméleti leírásával. A ^{103}Rh 357 keV energiájú állapotának g -faktorát hibán belül egyezőnek találtuk az irodalmi adatokkal, megjegyezzük, hogy eredményünk a legpontosabb, a Nuclear Data Sheets is azt fogadja el. A 295 keV-es állapotnál egyedül az irodalomban rámutattunk a nem megfigyelt közbelső átmenet döntő szerepére. Azt találtuk, hogy a jelenleg közölt elméleti leírások nem képesek reprodukálni a kísérleti mágneses nyomaték értékeket. Felhívtuk a figyelmet arra, hogy éppen a már említett közbelső átmenet miatt a ^{103}Rh izotóp szóbanforgó dublettje nem alkalmas a tranzien mágneses terek vizsgálatára.

A különböző vanádium-koncentrációjú ötvözetekkel végzett méréseink segítségével megállapítottuk, hogy a vanádium atomok lokalizált mágneses momentuma nem változik az alacsony vanádiumkoncentrációk tartományában, nagyobb koncentrációk felé pedig a változása kvalitatíve követi a koherens potenciál-közelítéssel számolt koncentrációfüggést.

A **Fe-Rh** ötvözetekben kapott belső tér értékeink kisebbnek adódtak, mint az NMR mérések eredményei. Az eltérést az ún. hőmérsékleti „spike”-nak tulajdonítottuk. Ugyanezzel a feltevéssel próbáltuk magyarázni a 48,5 at% ötvözet anomális viselkedését.

IRODALOM

1. K. Alder, A. Bohr, T. Huus, B. Mottelson and A. Winther, *Rev. Mod. Phys.* 28, 432, 1956.
2. R. M. Steffen and H. Frauenfelder, in „Perturbed Angular Correlation” (ed. by E. Karlsson, E. Matthias and K. Siegbahn), North-Holland, Amsterdam, 1964.
3. D. A. Shirley and G. A. Westenbarger, *Phys. Rev.* 138, A170, 1965
4. I. Talmi, in „Hyperfine Interactions in Excited Nuclei” (továbbiakban „HIEN”) (ed. by G. Goldring and R. Kalish), Gordon and Breach, 1971, p. 1133.
5. S. K. Bhattacharjee, *Annals of Phys.* 63, 613, 1971.
6. A. de Shalit and H. Feshbach: *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1974.
7. I. Lindgreen, *Arkiv Fysik* 29, 553, 1965.
8. I. Y. Krause, *Phys. Rev.* 129, 1320, 1963.
9. Y. Koi, A. Tsujimura and T. Hihara, *J. Phys. Soc. Jap.* 19, 1493, 1964.
I. Asayama, M. Kontani and J. Itoh, *ibid.* p. 1984.
10. A. de Shalit, *Phys. Rev.* 122, 1530, 1961.
11. L. Varga, I. Demeter, L. Keszthelyi, L. Pócs and Z. Szőkefalvi-Nagy, *Phys. Lett.* 29A, 171, (1969).
12. L. Varga, I. Demeter, L. Keszthelyi, Z. Szőkefalvi-Nagy and Z. Zámori, *Phys. Rev.* 177, 1783, (1969).
13. B. Dreyfus, P. Stetsenko and D. Thoulonze, *Phys. Lett.* 24A, 1967.
14. D. A. Shirley, S. S. Rosenblum and E. Matthias, *Phys. Rev.* 170, 363, 1968.
15. M. Kontani, M. Ota and Y. Masudar, *J. Phys. Soc. Jap.* 29, 1194, 1970.
16. S. K. Bhattacharjee, H. G. Devare, H. C. Jain and M. C. Joshi, in „HIEN” p. 1081.
17. W. M. Roney, H. W. Kugel, G. M. Heestand, R. R. Borchers and R. Kalish, in „Nuclear Reactions Induced by Heavy Ions” (ed. by R. Bock and W. R. Hering), North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 419.
18. G. D. Sprouse, in „HIEN” p. 931.
19. J. A. Cameron, A. W. Gibb, D. B. Kenyon and L. Keszthelyi, *Phys. Rev. Lett.* 24, 468, 1970.
20. Varga László, Kandidátusi értekezés, 1971.
21. L. Varga, I. Demeter, L. Keszthelyi, G. Mezey and Z. Szőkefalvi-Nagy, *Phys. Rev.* C6, 388, 1972.
22. J. M. Blatt and V. F. Weisskopf: *Theoretical Nuclear Physics*. John Wiley and Sons, New York. 1952.

23. *W. T. Sharp, J. M. Kennedy, B. J. Sears and M. G. Hoyle*, CRT—556, 1954.
24. *Gy. Bencze and J. Zimányi*, Acta Phys. Hung. 20, 209, 1966.
25. *E. Fermi*, Z. Phys. 60, 320, 1930.
26. *Vincze Imre*, Magyar Fizikai Folyóirat, 22, 279, 1974.
27. *E. Daniel*, in „Hyperfine Structure and Nuclear Radiation” (továbbiakban „HSNR”) (ed. by *E. Matthias and D. A. Shirley*), North-Holland, Amsterdam, 1968. p. 450.
28. *L. Grodzins*, Ann. Revs. Nucl. Sci. 18, 291, 1968.
29. *J. Lindhard and A. Winther*, Nucl. Phys. A116, 413, (1971).
30. *B. Herskind*, in „HSNR” p. 735.
31. *L. Varga and S. Koicki*, Phys. Lett. 30A, 312, 1969.
32. *M. Schmorak and E. Bogh*, in „HSNR” p. 712.
33. *C. Erginsoy, G. H. Vineyard, A. Englert*, Phys. Rev. A133, 595, 1964.
34. *E. T. Ritter, P. W. Keaton, Y. K. Lee, R. R. Stevens and J. C. Walker*, Phys. Rev. 154, 287, 1967.
35. *K. H. Hardy, J. C. Walker, R. Schnidman*, Phys. Rev. Lett. 29, 622, 1972.
36. *Kulcsár K., Nagy D. L. és Pócs L.*, SIRIUS-programrendszer, KFKI Programkönyvtár.
37. *Biri J., Somlai L., Zámori Z.*, publikálatlan jegyzet.
38. *F. K. McGowan and P. H. Stelson*, Phys. Rev. 109, 901, 1958.
39. *Y. Grunditz, S. Antman, M. Petterson and M. Saraceno*, Nucl. Phys. A133, 369, (1969).
40. Nuclear Data Sheets for $A=51$, Nucl. Data B3—5, 6—37, 1970.
41. *R. N. Horoshko, D. Cline and P. M. S. Lesser*, Nucl. Phys. A149, 562, 1970.
42. *E. N. Shipley, R. E. Holland, and F. J. Lynch*, Phys. Rev. 182, 1165, 1969.
43. *W. Scholz and F. B. Malik*, Phys. Rev. 147, 836, 1966.
44. *S. P. Repnikov, V. B. Ustinov*, Fiz. Tverd. Tel. 14, 2749, 1972.
45. *F. Kajzar*, J. Phys. F: Metal Phys. 7, 1623, 1977.
46. *M. F. Collins and G. G. Low*, J. Phys. 25, 596, 1964.
47. *A. T. Aldred*, Int. J. Magn. 2, 223, 1972.
48. *I. Demeter, Z. Szőkefalvi-Nagy, L. Varga and I. Vincze*, Hyp. Int. 2, 200, 1976.
49. *J. L. Black, W. J. Caelli and R. B. Watson*, Nucl. Phys. A125, 545, 1969.
50. *R. O. Sayer, J. K. Temperly and D. Eccleshall*, Nucl. Phys. A179, 122, 1972.
51. *Berényi Dénes*, személyes közlés.
52. *T. R. Miller and M. Takeda*, Nucl. Phys. A221, 392, 1974.
53. *R. Heusinger, W. Kreische, W. Lampert, K. Reuter, K. H. Roth and K. Thomas*, Proc. Int. Conf. on Hyperfine Interactions Studied in Nuclear Reaction and Decay, Uppsala, 1974. p. 62.
54. Nuclear Data Sheets for $A=103$, Nucl. Data Sheets 13, 337, 1974.
55. *A. W. Gibb*, személyes közlés.
56. *T. R. Miller, P. D. Bond, W. A. Little, S. M. Lazarus, M. Takeda, G. D. Sprouse and S. S. Hanna*, J. Phys. Soc. Jap. 34 Suppl. 1973 p. 107.
57. *Chr. Bargholtz*, USIP-Report 75—05 és személyes közlés.
58. *G. J. Dienes and G. H. Vineyard*: Radiation Effects in Solids. Interscience, New York, 1957.
59. *G. Shirane, C. W. Chen, P. A. Flinn and R. Nathans*, Phys. Rev. 131, 183, 1963.
- G. Shirane, R. Nathans and C. W. Chen*, Phys. Rev. 134, A1547, 1964.

A KÉTFAJTA LEPTONTÖLTÉSHEZ VEZETŐ TÉR VIZSGÁLATA*

PARRAGH LEVENTE

E dolgozatban az elsőfajú Christoffel szimbólumokban szerepeltetett antiszimmetrikus tenzor alkotta teret vizsgáljuk: először numerikusan, mint egy izotrop világ meghatározóját, majd általánosságban a klasszikus és nemrelativisztikus térelmélettel. Érintjük a tér kvantumdinamikáját. Végezetül numerikus megoldást is szolgáltatva tanulmányozzuk a tér-spinoráram kölcsönhatását a klasszikus térelmélet keretei között.

Ismert, hogy a Riemann-geometria kismértékű általánosításához jutunk, ha az elsőfajú Christoffel szimbólumokban az itt szereplő metrikus tenzort egy antiszimmetrikus $\varepsilon_{\alpha\beta}$ tenzorral egészítjük ki. E térhez egy spinoráram kétféle módon csatolódhat, ill. csatolatlan maradhat. E körülmény miatt három féle neutrínó egyenletet írhatunk fel. A hagyományos:

$$\sigma^{aa\dot{a}} \nabla_a \psi_a = 0. \quad (1)$$

egyenletet, mely fénysebességű, tehát zérus nyugalmi tömegű részecskék terét írja le. A semleges térrel tükörszimmetrikus módon kölcsönható spinorra:

$$\sigma^{aa\dot{a}} \nabla_a \psi_a \pm \frac{1}{2} e_1 \sigma^{aa\dot{a}} \sigma^{\zeta}_{a\dot{s}} \sigma^{\mu b\dot{s}} \lambda_{\alpha\zeta\mu} \psi_b = 0 \quad (2)$$

A semleges térrel tükörszimmetria sértő módon kölcsönható spinorra:

$$\sigma^{aa\dot{a}} \nabla_a \psi_a \pm \frac{i}{6} e_2 \sigma^{aa\dot{a}} E_{\alpha}{}^{\beta\gamma\delta} \lambda_{\beta\gamma\delta} \psi_a = 0 \quad (3)$$

Itt e_1 és e_2 dimenziótlan, valós csatolási állandók, és

$$\lambda_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial \varepsilon_{\gamma\alpha}}{\partial x^\beta} + \frac{\partial \varepsilon_{\beta\gamma}}{\partial x^\alpha} \right). \quad (4)$$

A (2) és (3) egyenletekkel jellemzett neutrínóknak már általában nyugalmi tömegük van.

Természetesen mindhárom neutrínó egyenlet variációs elvből származtatható.

A feltételezett semleges teret a

$$A = \kappa \lambda_{\alpha\beta\gamma} \lambda^{\alpha\beta\gamma} \quad (5)$$

* Érkezett 1981. dec. 10-én. E dolgozat a Kétfajta leptontöltés egy lehetséges geometriai értelmezése című dolgozat folytatása, ami megjelent a Magyar Fizikai Folyóiratban (27, 573, 1979).

Lagrange-függvénnyel jellemezhetjük, melyhez neutrínó nélküli térben a

$$\lambda^{\alpha\beta\gamma}_{;\gamma} = 0 \quad (6)$$

téregyenlet, és a

$$T_{\alpha\beta} = 6\kappa \lambda_{\alpha s\zeta} \lambda_{\beta}^{s\zeta} - \kappa \lambda_{\gamma s\zeta} \lambda^{\gamma s\zeta} g_{\alpha\beta} \quad (7)$$

energia-impulzus tenzor tartozik.

A $\lambda_{\alpha\epsilon\gamma}$ mennyiség, így a téregyenletek is invariánsak az

$$\varepsilon'_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\beta} + \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x^{\beta}} - \frac{\partial v_{\beta}}{\partial x^{\alpha}} \quad (8)$$

transzformációval szemben.

Megmutatható, hogy az 5 tér az Einstein-féle gravitációs térrel egy homogén és izotrop világot alkothat, és zárt világ esetén:

$$\lambda_{r\varphi}^s = \frac{1}{L} \frac{\sin \vartheta}{\cos 2 \frac{x^0}{L}}, \quad (9)$$

ill. nyílt világra:

$$\lambda_{r\varphi}^s = \frac{1}{L} \frac{\sin \vartheta}{\operatorname{ch} 2 \frac{x^0}{L}} \quad (10)$$

a tér megoldása.

Az egyenleteket egy 10^{26} m $\cong 10$ Gfév sugarú, $3 \cdot 10^{17}$ sec $\cong 10$ Ger életkorú, $H_0 = 17 \cdot 10^{-19}$ sec $^{-1} \cong 53$ km/sec Mpc Hubble-állandójú univerzumra numerikusan megoldva zárt, ill. nyílt világ esetén L értékére $2 \cdot 10^{26}$ m, ill. $1,5 \cdot 10^{26}$ m adódik, a tömegsűrűség pedig $4 \cdot 10^{-29}$ g/cm 3 , ill. $2 \cdot 10^{-29}$ g/cm 3 , tehát két nagyságrenddel meghaladja a becsült, optikailag megfigyelhető anyagsűrűséget, így annak figyelmen kívül hagyása talán megengedhető. Látható, hogy a λ tér rendkívül kis helyi hatás mellett képes egy univerzumot alkotni.

A 9, ill. 10 egyenletekből az is látható, hogy a $\lambda_{\gamma\varphi}^3$ tér az elmélet helyes volta esetén zárt világban az idővel nő, nyílt világban viszont csökken. Ha e tér hatását távoli objektumokon megfigyelhetnénk, akkor ez alapján is eldönthető lenne az univerzum zárt, ill. nyílt volta.

A következőkben az 5, 6, 7, 8 egyenleteket vizsgáljuk görbületlen, háromdimenziós térre és időre felbontott világban.

Az $\varepsilon_{\alpha\beta}$ tenzornak a szokásos módon két háromdimenziós vektor feleltethető meg:

$$E_{\bar{\alpha}} = \varepsilon_{\bar{\alpha}0} \quad (11)$$

$$B_{\bar{\alpha}} = \frac{1}{2} E_{\bar{\alpha}}^{\beta\bar{\gamma}} \varepsilon_{\beta\bar{\gamma}} \quad (12)$$

(Itt a felülvonással ellátott görög indexek csak az 1, 2, 3 értékeket futhatják be; $E_{\bar{\alpha}}^{\beta\bar{\gamma}}$ a háromdimenziós Levi—Civita tenzor.)

A (8) invariancia transzformáció hatása az E , ill. B vektorra a következő:

$$B' = B - \text{rot } K \quad (8a)$$

$$E' = E + \frac{1}{c} \frac{\partial K}{\partial t} - \text{grad } s, \quad (8b)$$

ahol K egy tetszőleges vektor, s egy tetszőleges skálár.

$$s = 0 \quad (13)$$

és

$$K = -c \int_{t_0}^t E dt \quad (14)$$

választással:

$$E' = 0 \quad (15)$$

$$B' = D = B + \text{rot } c \int_{t_0}^t E dt. \quad (16)$$

Tehát a teret az egyetlen D háromdimenziós vektorra vezettük vissza.

Most megadjuk a térnek a D vektorral való leírását:

A λ tenzornak a következő mennyiségek felelnek meg:

$$\lambda_{i23} = \frac{1}{2} \text{div } D \quad (4a)$$

$$(\lambda_{230}, -\lambda_{130}, \lambda_{120}) = \frac{1}{2c} \frac{\partial D}{\partial t}. \quad (4b)$$

A Lagrange-függvény a

$$A = \frac{3}{2} \kappa \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} \right)^2 - (\text{div } D)^2 \right] \quad (5a)$$

alakot ölti. A (6) téregyenletnek a

$$\frac{1}{c} \text{rot } \frac{\partial D}{\partial t} = 0 \quad (6a)$$

$$\text{grad div } D - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} = 0 \quad (6b)$$

egyenletek felelnek meg.

Az energia-impulzus tenzor vegyes komponensei:

$$T_{0\bar{x}} = 3\kappa \frac{1}{c} \frac{\partial D_{\bar{x}}}{\partial t} \text{div } D \quad (7a)$$

és az energia sűrűség

$$T_{00} = \frac{3}{2} \kappa \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} \right)^2 + (\text{div } D)^2 \right] \quad (7b)$$

alakú lesz.

A (6a) egyenlet miatt a D vektort egy φ skalárra vezethetjük vissza:

$$D = c \int_{t_0}^t \text{grad } \varphi \, dt. \quad (6c)$$

Ezt (6b)-be téve adódik, hogy:

$$c \int_{t_0}^t \text{grad div grad } \varphi \, dt - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{grad } \varphi = 0. \quad (6d)$$

A teret ebben a közelítésben igen könnyű kvantálni: A (6a) és (6b) egyenletekbe a D mennyiség Fourier-transzformáltját téve kapjuk:

$$\bar{n} \times \frac{\varepsilon}{c} \hat{D} = 0 \quad (6e)$$

$$\bar{n}(\bar{n} \hat{D}) - \frac{\varepsilon^2}{c^2} \hat{D} = 0, \quad (6f)$$

(Itt \bar{n} a háromdimenziós hullámvektor, ε ennek időszerű kiegészítése, a D mennyiség feletti kalap Fourier-transzformáltat jelent.) A megoldás a (6e) egyenlet alapján:

$$\hat{D} = \pm \bar{n} \hat{\varphi}. \quad (6g)$$

amit a (6f) egyenletbe téve adódik, hogy:

$$\varepsilon = \pm c |\bar{n}|. \quad (6h)$$

$$\omega = +c |\bar{n}| \quad (17)$$

jelöléssel diszkrét spektrumra kapjuk, hogy

$$\varphi(\vec{r}, t) = \sum_{\bar{n}} [\varphi^{+(\bar{n})} e^{i(\omega t + \bar{n}\vec{r})} + \varphi^{-(\bar{n})} e^{-i(\omega t + \bar{n}\vec{r})}]. \quad (18)$$

Ebből a V térfogatban levő impulzusra, ill. energiára adódik:

$$\bar{P} = \frac{6\kappa}{c^2} V \sum_{\bar{n}} \bar{n} \omega 2\varphi^+ \varphi^- \quad (7c)$$

$$P_0 = \frac{6\kappa}{c^2} V \sum_{\bar{n}} \omega^2 2\varphi^+ \varphi^-, \quad (7d)$$

ill.

$$\varphi^\pm \sqrt{\frac{6\kappa V \omega}{c^2}} = a^\pm \quad (19)$$

jelöléssel

$$\bar{P} = \sum_{\bar{n}} \bar{n} 2a^+ a^- \quad (7e)$$

$$P_0 = \sum_{\bar{n}} \omega 2a^+ a^-. \quad (7f)$$

Az a^+ , ill. a^- mennyiségeket részecske keltő, ill. eltüntető operátoroknak képzelve, a bozonokra vonatkozó

$$\hat{a}^-\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^- = \hbar \quad (20)$$

felcserélési relációt feltételezve kapjuk:

$$\hat{P} = \sum_{\bar{n}} \bar{n} \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{\hbar}{2} \right) \quad (7g)$$

$$\hat{P}_0 = \sum_{\bar{n}} \omega \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{\hbar}{2} \right) \quad (7h)$$

és

$$\hat{D} = \frac{c^2}{\sqrt{6\kappa V}} \sum_{\bar{n}} \frac{\bar{n}}{\omega^{3/2}} (\hat{a}^+ e^{i(\omega t + \bar{n}\bar{\varphi})} + \hat{a}^- e^{-i(\omega t + \bar{n}\bar{\varphi})}) \quad (16a)$$

Látható, hogy a teret fénysebességgel mozgó, zérus spinű részecskék alkotják.

A továbbiakban a λ térrel a 2 egyenletben megadott módon kölcsönható spinor jelenlétében érvényes klasszikus téregyenletekkel foglalkozunk. Az általános elméletből következik, hogy ekkor a (6) egyenletet a

$$\kappa \lambda^{\alpha\beta\gamma}{}_{;\gamma} = \pm \frac{c\hbar}{8} e_1 E^{\alpha\beta\gamma\delta} (\sigma_{\delta}{}^{a\dot{a}} \psi_a \psi_{\dot{a}})_{;\gamma} \quad (21)$$

egyenlettel kell helyettesíteni, melynek a D vektor és a

$$J_{\bar{a}} = c \sigma_{\bar{a}}{}^{a\dot{a}} \psi_a \psi_{\dot{a}} \quad (22)$$

áramsűrűség, ill.

$$\varrho = \sigma_0{}^{a\dot{a}} \psi_a \psi_{\dot{a}} \quad (23)$$

töltéssűrűség segítségével kifejtett alakja a következő:

$$\text{rot} \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} = \pm \frac{1}{\kappa} \frac{\hbar e_1}{4} \text{rot} J \quad (21a)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} - \text{grad} \text{div} D = \pm \frac{1}{\kappa} \frac{c\hbar}{4} e_1 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial J}{\partial t} - \text{grad} \varrho \right). \quad (21b)$$

A (21) egyenlet megoldása:

$$D = \pm \frac{c\hbar e_1}{4\kappa} \int_{t_0}^t J dt + c \int_{t_0}^t \text{grad} \varphi dt, \quad (24)$$

ahol a φ mennyiségnek változatlanul a (6d) egyenletet kell kielégítenie. Kiszámítva a λ teret, kapjuk:

$$\lambda_{123} = \pm \frac{1}{\kappa} \frac{e_1 \hbar c}{8} \varrho + \frac{c}{2} \int_{t_0}^t \text{div} \text{grad} \varphi dt \quad (4c)$$

$$(\lambda_{230}, -\lambda_{130}, \lambda_{120}) = \pm \frac{\hbar e_1}{8\kappa} J + \frac{1}{2} \text{grad} \varphi. \quad (4d)$$

Látható, hogy a spinoráram csak a maga helyén változtatja meg a λ teret, azon kívül közvetlenül nem befolyásolja azt.

A (7) energia-impulzus tenzor divergenciája adja a spinoráram és a λ tér kölcsönhatásának erő, ill. teljesítmény sűrűségét. Kiszámítva ezt a D vektor segítségével, majd ennek 24 megoldását behelyettesítve kapjuk:

$$f_{\bar{\alpha}} = \frac{3}{16} \frac{\hbar^2 e_1^2}{\kappa} (J \times \text{rot } J - c^2 \varrho \text{ grad } \varrho) \pm \frac{3}{4} \hbar e_1 \text{ grad } \varphi \times \text{rot } J + \\ + c \int_{t_0}^t \text{div grad } \varphi \, dt \left(\frac{1}{c} \frac{\partial J}{\partial t} - c \text{ grad } \varrho \right) \quad (25)$$

$$f_0 = \frac{3}{16} \frac{\hbar^2 e_1^2}{\kappa} J \left(\frac{\partial J}{\partial t} c \text{ grad } \varrho \right) \pm \frac{3}{4} \hbar e_1 \text{ grad } \varphi \left(\frac{1}{c} \frac{\partial J}{\partial t} - c \text{ grad } \varrho \right). \quad (26)$$

Látható, hogy az erő, ill. a teljesítmény sűrűség a λ tértől független, közvetlen áram-áram önvisszahatásból; és a λ térszínoráram kölcsönhatásból áll.

Könnyű megmutatni, hogy nyugalomban levő spinorsűrűségnél ez az önvisszahatás egyensúlyt tarthat a Coulomb erővel. Ekkor teljesülni kell a

$$- \frac{3}{16} \frac{\hbar^2 e_1^2}{\kappa} c^2 \varrho \text{ grad } \varrho + e \varrho E_v = 0 \quad (27)$$

egyenletnek, ahol E_v az elektromos térerősség. Az egyenletet gömbszimmetrikus esetre felírva kapjuk:

$$- \frac{3}{16} \frac{\hbar^2 e_1^2}{\kappa} c^2 \varrho \frac{d\varrho}{dr} + \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{\varrho}{r^2} \int_0^r \varrho(u) u^2 du = 0, \quad (27a)$$

melynek megoldása:

$$\varrho = A \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{a}} \quad (28)$$

ahol A integrálási állandó, és

$$a = \sqrt{\frac{3}{16} \frac{\hbar^2 c^2 e_1^2}{\kappa} \frac{\varepsilon_0}{e^2}}. \quad (29)$$

Az $e_1 \approx 1$ feltételezéssel elektronnyi töltésre $a \sim 10^{-33}$ m, tehát a töltés rendkívül kis helyre lokalizált.

Látható, hogy ez az elmélet rendkívül erős áram önvisszahatást jósol, ami — nyilván kvantumos formában — befolyást gyakorolhat az elemi részek szerkezetére.

VEGYÜLETFÉLVEZETŐK*

LENDVAY ÖDÖN

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézete, Budapest

1. BEVEZETÉS

A mikroelektronikai ipar rohamos fejlődése az elmúlt 20 évben a legjobb példa a műszaki-tudományos forradalom jelentőségének bemutatására. Ez az ipar termelési értékét tekintve (közel 13 milliárd dollár/év) megközelíti az acél-, autó- és olajipart. Társadalmi hatását tekintve már jelenleg is döntő tényezővé vált, jövőbeli szerepe pedig felmérhetetlen. Ma a fenti nagyipar csaknem kizárólagos alapanyaga a szilícium, noha a félvezetők működésének alapjelenségeit, a $p-n$ átmenetet és a tranzisztorhatást Ge-on fedezték fel 1947-ben [1—3]. Azonnal megindult a jelenségek ipari alkalmazása is. A Ge szilárdtest eszközök nem csak a rádiócsöveket váltották ki fokozatosan, hanem új lehetőségek tömegét biztosították az elektronikában.

A Si tranzisztort 1954—55-ben dolgozták ki a Bell Laboratóriumban, és itt alakultak ki a planáris technológia döntő elemei is [4, 5]. Az új anyag úgyszólván hónapok alatt kisöpörte a Ge-et a kutatás-fejlesztéstől a tömeggyártásig terjedő területről, és megindult az a fejlődés, ami a mai, integrált áramkörökben a szinte hihetetlen méretredukcióhoz és elemsűrűséghez, a számítástechnikai és a szilárdtest elektronika fantasztikus fejlődéséhez vezetett. Ennek a fejlődésnek a Si egykristály az alapja, melynek fizikai és kémiai tulajdonságai csaknem ideálisak az áramkörtervezés céljaira. Különösen a Si oxidja, a félvezető/oxid rendszer tulajdonságai kedvezőek planáris technológiák kidolgozására, a méretek drasztikus redukálására és összetett félvezető rendszerek (pl. fém/oxid/félvezető ún. MOS rendszerek) előállítására. A mesterségesen növesztett óriási Si egykristályok a ma ismert legtökéletesebb kristályok, melyeket akár természeti állandók — mint pl. az Avogadro szám [6] — meghatározására is használhatunk.

A kedvező tulajdonságok, az ipari alkalmazás óriási volumene és az előállított eszközök sokasága és sokoldalú felhasználása mellett furcsának tűnik, hogy egyre szélesebb körben merül fel új anyagok, a vegyületfélvezetők alkalmazásának igénye. Ezeket az anyagokat — különösen a GaAs-t — már ma is számos területen alkalmazzák, és valamennyi prognózis rohamos fejlesztésükkel és alkalmazási körük terjedésével számol. Várható tehát egy, a Ge—Si-hoz hasonló őrsgváltás a mikroelektronikai alkatrész-iparban? A félvezető tulajdonságok mellett a korszerű ipari technológiák és termelési költségek, a kutatás-fejlesztésre fordított eszközök megoszlása és az eszközök alkalmazhatósági körének vizsgálata egyértelműen azt mutatja, hogy nem.

* Az 1981. évi Székesfehérvári Fizikus Vándorgyűlésen elhangzott előadásnak megfelelő rövid részlete megjelent a Fizikai Szemlében.

* Érkezett 1982. május 12.

A vegyületfélvezetők iránt rohamosan növekvő igény abból az egyszerű tényezőbből ered, hogy az elemi félvezetők (Ge, Si) fizikai tulajdonságaik rögzített volta következtében számos új igényt már nem tudnak kielégíteni. Az elektronikus funkciók bővülése és betörése a mikrohullámú és optikai területekre, az interdiszciplináris területek rohamos fejlődése új anyagokat kíván. Ezeken a területeken a Ge és Si sávszerkezeti tulajdonságai (az adott értékű tiltott sáv, az indirekt sávszerkezet stb.) gátjai az alkalmazások bővítésének.

2. VEGYÜLETFÉLVEZETŐK

A szilárdtest-fizikában a félvezető fizika igazi születésnapjaként a Ge-tranzisztor felfedezését tartják számon 1947-ben [1], melyet gyorsan követett a jelenség részletes leírása, értelmezése és a $p-n$ átmenettel megvalósított forma [2, 3]. A félvezető időszámítás ilyen keltezése — ha a mikroelektronika jelentőségére gondolunk — indokolt, még akkor is, ha a vegyületfélvezetőkre vonatkozó ismereteink régebbiek, és nem csak a félvezető-időszámítás, hanem a történeti időszámítás szerint is az időszámítás előtti időkre nyúlnak vissza.

A legrégebbi, a félvezető jelenségek körébe tartozó jelenség a lumineszcencia. A lumineszkáló anyagok nagy része félvezető vegyület, melyek néhány képviselője a természetben is megtalálható. Lumineszcenciájukat — a nap vagy mesterséges fényforrás rövid hullámhosszú (pl. ultraibolya) részének átalakítását hosszabb hullámhosszúságú fénné — még az elemi félvezetők felfedezése előtt megfigyelték. Az első, mesterséges lumineszkáló vegyületet 1600-ban Vincenzo Cascariolo alkimista állította elő Bolognában barit-ásványból. Ez volt a híres „bolognai kő”, mely nappali megvilágítás után sötétben vörös fényben világított. A mesterséges lumineszcens anyagok, az ún. „luminoforok” tudományos igényű vizsgálata Párizsban, a Sorbonne-on indult meg 1866-ban, amikor Sidot előállította az első, mesterséges ZnS kristályt. A mesterséges ZnS erős foszforeszcenciát mutatott. A ZnS kutatásában, majd más, mesterséges luminoforok előállításában olyan nagyságok vettek részt, mint Crookes, Lenard és Becquerel. Lenardot pl. ezek a kutatások csaknem a modern atomelmélet küszöbére vezették el. Az általuk előállított anyagok vegyületek, többségükben vegyületfélvezetők voltak.

A luminoforok vagy más néven kristályfoszforok kutatásának igen nagy lökést adott a fluoreszcens fényforrások, az ún. „fénycsövek” feltalálása, mely a mai, nagyipari tömeggyártáshoz vezetett [7]. Igen nagy erőket mozgósítottak az ún. Destriaueffektus [8, 9] hasznosítására is, ez azonban nem váltotta be a hozzáfűzött reményeket. (Váltóáramú, villamos térben dielektrikumba ágyazott ZnS mikrokristályok intenzív lumineszcens sugárzást bocsátanak ki.) Mindkét terület mikrokristályos, nagy tiltott sávú anyagokat alkalmaz, és sem előállítási és feldolgozási technológiájukat, sem vizsgálati módszereit tekintve nem sorolhatók a mai értelemben vett félvezető területhez.

A félvezető eszközök előállítására alkalmas vegyületek felfedezése és alkalmazása 1950-ben indult meg, a periódusos rendszer 3. és 5. oszlopainak elemeiből képezett vegyületek félvezető tulajdonságainak kutatásával. *Welker*, a Siemens kutatója és a ragyogó, fiatalon elhunyt szovjet kutatónő, *Goryunova* Leningrádban egyidőben fedezte fel, hogy az elemi félvezetőkhöz, a Ge és Si-hoz és a szürke ónhoz hasonló kristály- és elektronszerkezettel rendelkező vegyületek szintén félvezetők [10–12].

2.1 A kémiai kötés szerepe

A szilárd testeket öt, egymásba átfolyó csoportba szokták sorolni; az elektro-pozitív és átmeneti fémek, valamint az ionos kristályok, félvezetők és molekula-kristályok csoportjába. Az átmeneti fémeket az különbözteti meg az egyszerű fémek-től (ilyen pl. a Na v. Al), hogy d -héjukon is vannak a kémiai kötésben résztvevő elektronok. Ezek a fémek mágnesesek ($3d$ héj) és szupravezetők ($4d-5d$ héjak). A ritkaföld-fémek $4f$ és $5f$, kötésben résztvevő elektronjaikkal az átmeneti fémek különleges eseteinek tekinthetők. Valamennyi fém elektronvezető.

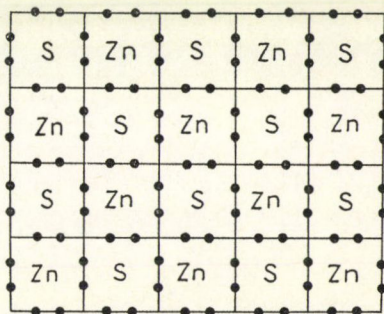
Az ionos kristályok elektronpozitív kationokból és elektronegatív anionokból állnak, melyekben az elektromos töltés az ionokon lokalizálódik, vezetésükben domi-náns az ionos vezetés. A molekulakristályokat van der Waals erők tartják össze, az egyes molekulákban a rácspontokon a betöltött elektronállapotokat tilos sáv választja el az üres állapotoktól. Mivel a molekulák közötti kötés gyenge, a rácspontok közötti kommunikáció is az, és az ilyen kristályok a szobahőmérsékletű ionos rácsok több-ségéhez hasonlóan szigetelők.

A félvezetők a fémek és a szigetelők között helyezkednek el. Jellemző tulajdon-ságuk a tetraéderes szimmetriájú, orientált sp^3 hibridpályák jelenléte, melyek jelentős kovalens hányadot tartalmazó kötések hoznak létre. A betöltött elektronállapotokat (vegyérték-sáv) 1 eV nagyságrendű tiltott zóna választja el a betöltetlen állapotoktól (vezetési sáv), ez azonban inkább csak tájékoztató érték, hiszen a 0,1 eV-tól a 3 eV-ig terjedő tartományban a legtöbb anyagot félvezetőnek szokás tekinteni. Az ilyen anyagokban atompáronként 8 elektron található, azaz egy atomra átlagosan 4 vegy-értékelektron jut.

A tetraéderes kötés lehetőségére vonatkozó első utalások már a legelső kvantum-kémiai elképzelések során megjelentek. *Grimm és Sommerfeld* [13] 1926-ban feltéte-lezte, hogy az elemek stabil 2, 8 és 18-as elektronkonfigurációjához hasonlóan létez-niök kell olyan vegyületeknek is, melyekben minden atomhoz 4 elektron tartozik. A 8-elektronos, stabil koordináció úgy alakul ki, hogy a saját elektronokhoz tetra-éderes koordináció esetén a közvetlen szomszédok is hozzájárulnak 1—1 elektronnal. Ilyen kötést tételeztek fel az akkor már jól ismert ZnS-re és AlN-re is, melyek szer-kezetét az 1. ábra szerinti elrendezésben írták fel. A fenti anyagok mellett feltételez-ték, hogy további, általuk MX-nek jelölt vegyületeknek is kell létezniök hasonló szerke-zettel.

Az eltelt időben az MX helyére számos vegyületet helyettesítettek be. Kémiai szem-pontból a IV. oszlop elemeitől eltekintve több, sp^3 tetraéderes kötésű, szfalerit (v. wurtzit) rácsú anyagot fedeztek fel, melyek teljesítik a 4 elektron/atom átlagos elektronsűrűség mel-lett a kovalencia-feltételeket is.

A tetraéderes sp^3 kötés csak szükséges, de nem elégséges feltétele félvezető kristályok ke-ltekezésének. Határozott félvezető jelleg kial-akulásához a kötés jellegének, a kovalens, ill. ionos kötéshányad megfelelő értékére is szük-ség van. A két tényező szoros kapcsolatban



1. ábra. Az AlN és ZnS kötésének Grimm—Sommerfeld modelje, mely a tetraéderes kötés első, kvalitatív megfogalmazása vegyületekre

van egymással; az egyszerű mechanikai modelből pl. a LiI-nak tetraéderes rácsának kellene lennie, mivel az ionsugarak hányadosától függően $1,0 \geq \varrho = r_+/r_- \geq 0,732$ értékénél CsI rács (nyolcas koordináció), $0,732 \geq \varrho \geq 0,414$ -nél NaCl rács (hatos koordináció), és $\leq 0,414$ értékénél tetraéderes koordináció lép fel. A LiI esetén $\varrho \approx 0,277$, ennek ellenére kősó rácsú, tehát a tetraéderes szerkezet nem következik automatikusan a mechanikus modell paramétereiből; a katon-anion sugarak arányából.

A kötés jellege döntő. Az ionos és kovalens hányadot is tartalmazó kémiai kötésre a vegyértékelektron hullámfüggvénye AB vegyületben

$$\psi = \psi_{sp^3}(A) + \lambda_i \psi_{sp^3}(B), \quad (1)$$

ahol az ψ_{sp^3} függvények az A , ill. B atomközpontú, hibridizált, ortogonális vegyértékpályák hullámfüggvényei, λ_i pedig állandó. Ha a kötésben f_i és f_n -val jelöljük az ionos és kovalens hányadot ($f_i + f_n = 1,0$)

$$f_i = \frac{1 - \lambda_i^2}{1 + \lambda_i^2} = 1 - \exp \left| -\frac{(X_A - X_B)^2}{4} \right|, \quad (2)$$

ahol az X_i értékek a Pauling-féle elektronegativitások [14]. Felhasználva X_i értékeit Mooser és Pearson [15] fenomenologikusan az $A^n B^{8-n}$ vegyületek döntő többségére helyesen adta meg a kristályszerkezetet; ábrázolva az átlagos főkvantumszámot, $\bar{n} = (n_A + n_B)/2$ -t $\Delta X(r_B/r_A)$ függvényében, a sík meghatározott tartományában helyezkednek el a tetraéderes koordinációjú félvezető vegyületek. Lényegesen jobb szétválasztást ért el Philips és Van Vechten [16, 17] a tetraéderes (szfalerit, wurtzit) és a kősó rácsok (oktaéderes koordináció) között, bevezetve az E_g tiltott sávra az

$$E_g^2 = E_h^2 + C^2 \quad (3)$$

kifejezést, ahol

$$E_h(AB) = E_h(Si) \left(\frac{d_{Si}}{d_{AB}} \right)^{2,5} \quad (4)$$

(4) egyenletben a tiltott sáv „kovalens” összetevője $E_h(AB)$ a Si tiltott sávjának, és a d_i kötéstávolságok hányadosának a függvénye. A tiltott sáv „ionos” összetevője, C függ az alkotó atomok iontörzseinek töltésétől, Z_A és Z_B -től, az alkotó atomok kovalens sugarától, és a Thomas—Fermi hullámszámtól, k_s -től.

$$C = 1,5 \left(\frac{Z_A}{r_A} - \frac{Z_B}{r_B} \right) e^2 \cdot \exp(-k_s^r), \quad (5)$$

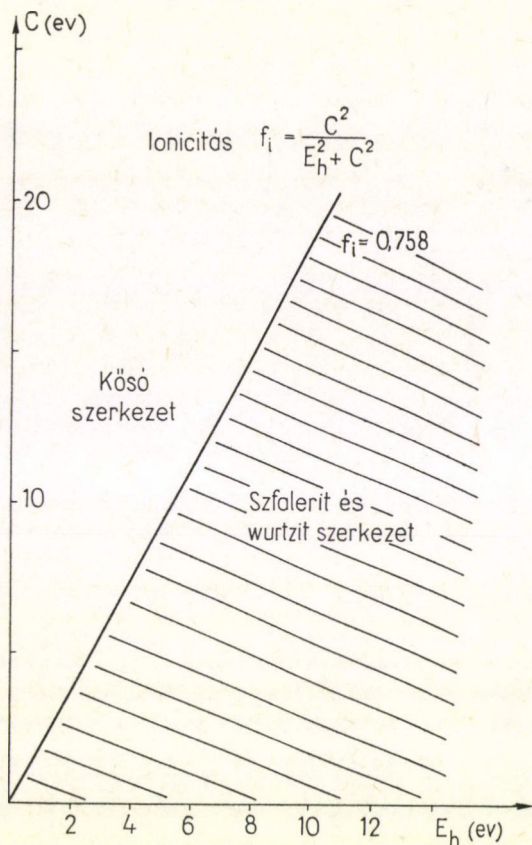
ahol \bar{r} értéke $(r_A + r_B)/2$.

A kötés Philips szerinti ionicitása az $A^n B^{8-n}$ vegyületre:

$$f_i = \frac{C^2}{(E_h^2 + C^2)} = \frac{C^2}{E_g^2}, \quad \text{ahol } 0 \leq f_i \leq 1,0 \quad (6)$$

és értelemszerűen $f_h = 1 - f_i = E_h^2/E_g^2$.

Ábrázolva az egyes $A^n B^{8-n}$ vegyületekre E_h (eV) értékeit C (eV) függvényében, a 2. ábrának megfelelően az $f_i = 0,785$ egyenes nagy biztonsággal szétválasztja a



2. ábra. Félvezető vegyületekre jellemző tetraédes rácsok (gyémánt, szfalerit wurtzit) fellépése az $A^n B^{8-n}$ vegyület kémiai kötésében jelenlevő kovalens hányad (a tiltottsáv kovalens hányada) függvényében

tetraédes adamantin (gyémánt, szfalerit, wurtzit) és az oktaédes (kőso) rácsú vegyületeket [18]. Ez azt mutatja, hogy a félvezető tulajdonságok kialakulása szempontjából a kémiai kötésnek meghatározó szerepe van.

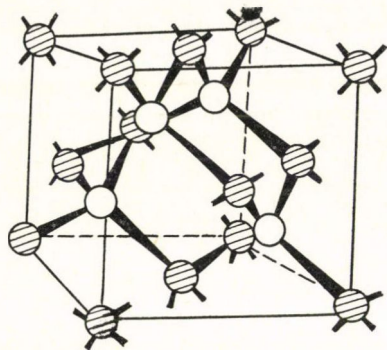
2.2 A kristályszerkezet

Az AB vegyület kristályaiban kialakuló sp^3 hibrid adamantin [19] (szfalerit vagy wurtzit rácsot) hoz létre.

A szfalerit-rács — mely a gyémánt tetraédes rácsából származtatható le — a 3. ábrán látható. Köbös tércsoportú, a tetraédesen koordinált atomok egymástól

való távolsága $1/4 \sqrt{3}a$, ahol a az elemi cella élhossza. A 12 második szomszéd távolsága $1/2 \sqrt{2}a$, ezekből a 6 vizsgált rácspont síkjában egy hatszög csúcsain, 6 pedig egy trigonális antiprizma csúcsain helyezkedik el.

A szfalerit szerkezetnek nincs inverziós szimmetriája az ellentett (hkl) és $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ irányokba, ezért piezoelektromos tulajdonságokat mutat. Megvizsgálva az ábrán

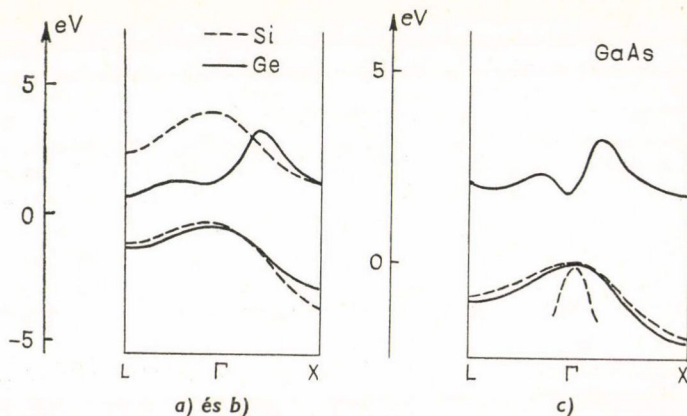


3. ábra. A leggyakoribb adamantin rác, a szfalerit szerkezete. Az elemi cella kétfajta (A és B) atomot tartalmaz

látható elemi cellát, látható, hogy az $\langle 111 \rangle$ irányba (a kocka testátlója) található atomok közötti távolság igen eltérő; $1:3$ irányba változik; azaz két „kvázivakancia” helyet tartalmaz. (Ezek nem valódi vakanciahelyek, mivel nem rácspontok, csupán a $A-B$ atomtávolság változik $1/4 \sqrt{3}a$ -ról $3/4 \sqrt{3}a$ -ra.) Az egyik hely a kocka középpontjának felel meg, és a testátló negyedével eltolt alrác atomjai koordinálják tetraéderesen. Ugyanezt a helyet $a/2$ kötéstávval 6 atom koordinálja az elemi cella csúcsait kitűző alrác atomjaiból. A három $A-B$ távolságra levő hely koordinációja csupán annyiban különböző, hogy a koordinációban résztvevő atomok az előzőekkel ellentétes típusúak. A fenti atom-elrendeződés miatt a vegyérték elektronok eloszlása nem szimmetrikus, és előfor-

dulási valószínűségük az egyes síkokba és irányokba függ az ionméretektől és a kitöltöttségtől is.

Ha az elektron hullámfüggvényének értéke az $\langle 111 \rangle$ irányba mindkét vakanciahelyen azonos és tetraéderes szimmetriájú, akkor a Ge-hoz hasonló sáv szerkezet (indirekt sáv, L -minimum) alakul ki. Ha a két vakanciahely között energiakülönbség van, csak az egyik tölthető be vezetési elektronnal, szemben az előző esettel, ahol mindkét hely betölthető, ilyenkor a saját függvény oktaéderes szimmetriájú az $\langle 100 \rangle$ irányoknak megfelelően. Ez a Si-hoz hasonló sáv szerkezetet hoz létre (X -minimum indirekt sáv). Jelentősen torzulhat ez az állapot akkor, ha az ionméretek



4. ábra. Félvezető vegyületek sáv szerkezete. a — Ge-típus (L -minimum); b — Si-típus (X -minimum); c — direkt sáv szerkezet (Γ -minimum)

megnövekedése miatt az intersticiális tér csökken az elemi cellában. Ilyen esetekben direkt sávszerkezet kialakulására van lehetőség, azaz a periódusos rendszer oszlopaiban lefelé haladva egyre nagyobb a valószínűsége a direkt sávszerkezetű vegyület-félvezetők kialakulásának. Ilyen pl. az $A^{III}B^V$ vegyületek többségének sávszerkezete, mely a 4. ábrán látható.

2.3 Nyolcelektronos struktúrák

A félvezető tulajdonságok kialakulásához szükséges 8 elektronos, tetraédes szerkezet kialakulására több lehetőség van. A legegyszerűbb eset a két, különböző elemből álló „biner” AB vegyület keletkezése. A periódusos rendszer 7, különböző oszlopának elemeiből

$$C_m^n = \frac{m!}{n!(m-n)!} = \frac{7!}{2!(7-2)!} \quad (7)$$

biner vegyület képezhető. Ezekből csupán 9 olyan AB vegyület állítható össze, ahol A és B vegyértékelektronjainak száma 8, A -ra <4 , B atomra >4 , 12 variáció ui. nem teljesíti ezt a feltételt, és kizárható.

A fenti vegyületosztályok [14]:

Vegyértékelektronok	1—5	1—6	1—7	2—5	2—6	2—7	3—5	3—6	3—7
Típus	$A^I B_3^V$	$A^I B_3^{VI}$	$A^I B^{VII}$ (CsI)	$A^{II} B_2^V$ (ZnAs ₂)	$A^{II} B^{VI}$ (ZnS)	$A^{II} B_2^{VII}$	$A^{III} B^V$ (GaAs)	$A^{III} B^{VI}$ (Ga ₂ Se)	$A^{III} C^{VII}$

Ezekből a csoportokból csupán az ún. „egyszerű” esetek; az $A^I B^{VII}$, $A^{II} B^{VI}$ és $A^{III} B^V$ csoport analóg az elemi félvezetőkkel. Hasonló módon belátható, hogy a 7 oszlop elemeiből képezhető ternérek (3 atomfajtát tartalmazó vegyületek) száma 35, melyek közül csak 5 teljesíti az $A_{1-x-y}B_xC_y$ ($A < B < C$ oszlop) vegyületekre vonatkozó korlátozó feltételeket; amelyeket a következő formában fogalmazhatunk meg:

$$A(1-x-y) + Bx = (8-C)y, \quad (8)$$

mely a négyelektronos átlag feltétele miatt

$$A(1-x-y) + Bx + Cy = 4, \quad (9)$$

melyből $y=1/2$ és $x = \frac{8-A-C}{2(B-A)}$ azaz $A_{1/2-x}B_xC_{1/2}$. Teljesülnie kell a következő feltételnek is:

$$0 < x = \frac{8-A-C}{2(B-A)} < \frac{1}{2} \quad (10)$$

mivel az alsó indexek összege 1. Miután mind kétanionos, mind kétkationos változatok elképzelhetők, az öt osztály megkétszereződik, és a következő csoportok alakíthatók ki, melyek az I. táblázatban láthatóak.

I. TÁBLÁZAT

8 elektronos, ternér vegyületek osztályai

Két kationos	Vegyérték-elektronok	1—3—6	1—4—5	1—4—6	1—5—6	2—4—5
	Típus	$A^I B^{III} C_2^{VI}$ (CuFeS ₂)	$A^I B^{IV} C_3^V$ (CuGe ₂ P ₃)	$A_2^I B^{IV} C_3^{VI}$ (Cu ₂ GeS ₃)	$A_3^I B^V C_4^{VI}$ (Cu ₃ QsS ₄)	$A^{II} B^{IV} C_2^V$ (ZnGeP ₂)
Két anionos	Vegyérték-elektronok	2—5—7	3—4—7	2—4—7	2—3—7	3—4—6
	Típus	$A_2^{III} B^V C^{VII}$	$A_3^{III} B_2^{IV} C^{VII}$	$A_3^{II} B^{IV} C_2^{VII}$	$A_4^{II} B^{III} C^{VII}$	$A_2^{II} B^{IV} C^{VI}$

Ezekből a csoportokból egyedül az $A^{II} B^{IV} C_2^V$ csoport bír gyakorlati jelentőséggel, az ide tartozó vegyületek azonban már nem szfalerit, hanem kalkopirit rácsúak. Ez, szimmetriaviszonyait tekintve még alacsonyabb szimmetriaosztályba tartozik, mint a szfalerit.

A fenti vegyületcsoportoknál félvezető szempontból lényegesen fontosabbak azok a ternér vegyületek, melyekben a különböző kationok vagy anionok a periódusos rendszer azonos oszlopához tartoznak, ezért az $A_{1-x}^{III} B_x^{III} C$, illetve az $A^{III} B_{1-y}^V C_y^V$ képlettel írhatók le. Ezekről a vegyületekről az $A^{III} B^V$ típusú anyagoknál még részletesen szó lesz.

Az AB binér és ABC ternér vegyületekhez hasonlóan megvizsgálhatók a négy, különböző oszlopba tartozó elemekből keletkező kvaternér, $ABCD$ típusú vegyületek is. Ezekből 35 állítható össze, mindegyik előfordulhat egy-, két- és háromkationos, ill. anionos formában is, ezért a variánsok száma megsokszorozódik. Ezek a vegyületek gyakorlatilag nem jelentősek, ezért a részletes tárgyalásukra nem térünk ki. Lényegesen fontosabbak a két oszlophoz tartozó elemekből keletkező (pl. az $A_x^{III} B_{1-x}^{III} C_y^V D_{1-y}^V$ típusú) vegyületek, melyeket szintén a későbbiek során ismertetünk.

Az egyes csoportok között gyakran lehet kapcsolatot találni; az $A^{III} B^V$ csoportból vezethetők le pl. az $A^{II} B^{IV} C_2^V$ vegyületek; vagy az $A^{II} B^{VI}$ családnak felel meg az $A^I B^{III} C_2^{VI}$ csoport az 5. ábrának megfelelően. Számos izoelektronos homológ állítható fel a fentiekhez hasonló módon. Ezek döntő többségére érvényes *Goldschmidt* 1927-ben megállapított szabálya [20], melynek értelmében az ilyen homológok rácsállandója is közel azonos. Az adamantin csoportban pl. a Ge homológokat a II. táblázatban mutatjuk be.

Hasonló sorozat állítható össze az Sn—InSb—GaTe—AgI homológokra, ha a kiindulási félvezető elemből közvetlen szomszédjait képezzük protoncserével. Ezek ui. szubsztituálhatóak a protoncserével kialakított újabb elemekkel, az 5. ábrának megfelelően.

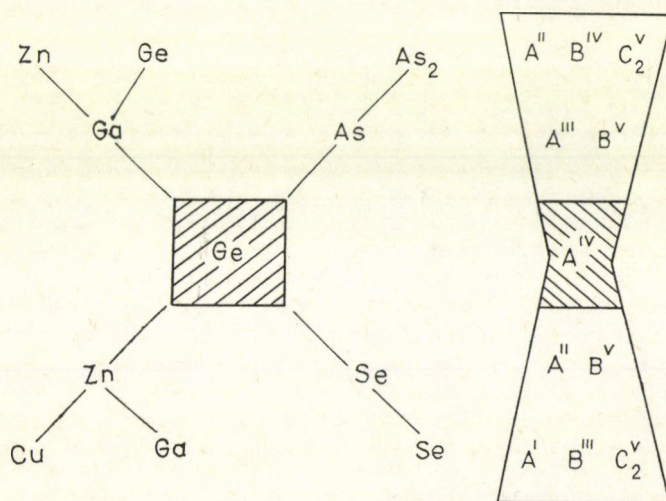
A binér és a periódusos rendszer két oszlopához tartozó ternér és kvaterner vegyületek elsősorban az $A^{II} B^{VI}$ és az $A^{III} B^V$ vegyületcsoportba ismeretesek, gyakorlati jelentőségük főleg ezeknek az anyagoknak van. A periódusos rendszerben távol levő elemek a relative nagy elektronnegativitás-különbség miatt ($\Delta X \geq 2$) ionos rácsokat alkotnak, ezért még a 8 elektronos konfigurációk sem félvezetők. Ez az oka annak, hogy a további tárgyalásból kizárjuk az $A^I B^{VI}$ és az $A_a^{II} B^{VI}$ vegyületeket, ahol az index a II. oszlop a csoportját (Be, Mg, Ca, Sr és Ba) jelenti. A fenti korlá-

II. TÁBLÁZAT

Ge-al homológ, izoelektronos félvezető vegyületek

Vegyület	Típus	Rácsállandó (nm)	Szerkezet	Tiltott sáv 300 K (eV)
Ge	A^{IV}	0,56675	gyémánt	0,67
GaAs	$A^{III}B^V$	0,56532	szfalerit	1,35
ZnGeAs ₂	$A^{II}B^{IV}C_2^V$	0,5672 (1,115)	kalkopirit	0,85
CuGe ₂ As ₃	$A^IB_2^{IV}C_3^V$	—	adamantin	—
ZnSe	$A^{II}B^{VI}$	0,5668	szfalerit	2,58
CuGaSe ₂	$A^IB^{III}C_2^{VI}$	0,5596 (1,100)	kalkopirit	1,71
Cu ₂ GeSe ₃	$A_2^IB^{IV}C_3^{VI}$	0,5591 (0,556)	ortorombos	—
Cu ₃ AsSe ₄	$A_3^IB^VC_4^{VI}$	0,557 (1,096)	famatinit	—
Cu ₂ ZnGeSe ₄	$A_2^IB^{II}C^{IV}D_4^{VI}$	0,562 (1,105)	stannit	—
CuZn ₂ GaSe ₄	$A^IB_2^{II}C^{III}D_4^{VI}$	0,565 (1,130)	stannit	—
CuBr	A^IB^{VII}	0,5691	szfalerit	2,94

tozás mellett a 8 elektronos csoportot ki kell bővítenünk a SiC-al, mely az egyetlen olyan $A^{IV}B^{IV}$ vegyület, melynek gyakorlati jelentősége van és megfelel a félvezető vegyületekkel szemben támasztott követelményeknek. A SiC egyike a legérdekesebb anyagoknak, mivel kristályszerkezete a politypia miatt rendkívül változatos. A szfalerit és wurtzit mellett alacsonyabb szimmetriájú SiC politípek (pl. 15R — ami 15 réteges, romboéderez rács) számos változatát ismerjük, ezért az anyag tilos sávja egész széles tartományban; 2,60 eV-től 3,33 eV-ig változik az elektronaffinitással együtt. Adalékokkal mind elektron, mind lyukvezetés előállítható. Történeti érdekesség, hogy a ma már széles, ipari gyakorlatban — tömeggyártásban — levő eszközök őse a SiC tús detektor, melyen *Losew* felfedezte 1923-ban az injekciós lumineszcenciát [21].



5. ábra. Ga-ból levezethető $A^{II}B^{VI}$; $A^{III}B^V$; $A^IB^{III}C_2^{VI}$ és $A^{II}B^{IV}C_2^V$ típusú vegyületek

3. BINÉR ÉS TERNÉR FÉLVEZETŐK

3.1 II—VI vegyületek

A kötés kovalens jellege miatt gyakorlatilag csak a II—VI és III—V vegyületeket, valamint a fentiekből lezármaztatható II—IV—V₂ és I—III—VI₂ típusú vegyületeket kell vizsgálnunk. Mint említettük, a II—VI vegyületek között a IIa oszlop vegyületei még ionosak, ezért csak a b oszlop jön számításba. Ezek között számos, természetben is előforduló anyag van; ilyen pl. a ZnS és CdS, valamint az oxidok. Igen sok, a technikai fejlődést meghatározó területen alkalmazták őket. A szulfidok egyik legfontosabb alkalmazásukat a katódsugárcsőekben, a képernyő anyagaiként nyerték el, mivel kiváló katódlumineszcens anyagok, de számos egyéb optoelektronikai alkalmazásuk is ismert. Fotoellenállások, napelemek, fénydiódák és nukleáris detektor készülnek segítségükkel. Mikrokristályos és egykristályos formában egyaránt felhasználják őket. Legjellegzetesebb képviselőiket és legfontosabb fizikai adataikat a III. táblázat tartalmazza. Valamennyi szfalerit, ill. wurtzit szerkezetű.

A hexagonális wurtzit szintén tetraéderes szimmetriájú koordinációval jön létre a szfalerithez hasonlóan, azaz a közvetlen szomszédok elrendeződése azonos a kristályrácsban. Csupán a harmadik szomszéd (ill. atomréteg a szorosilleszkedésű $\langle 111 \rangle$, ill. $\langle 0001 \rangle$ irányba) helyzete más a két rácsban. Mivel a VI. oszlop elemeinek elektronnegativitása jelentősen eltér a II. oszlop elemeitől, a kötés ionos jellege számottevő, és a kationon megjelenő effektív töltés $+0,77$ -től (CdS) $+0,066$ -ig (ZnTe) változik. Az atomszám növekedésével csökken az ionos jelleg, csökken a képződéshő, nő a kötéstávolság. A wurtzit szerkezet megjelenése is az ionicitás fokozódásával együtt jelentkezik; elsősorban a szulfidoknál (pl. a ZnS és CdS-nél) jellemző, és egyáltalán nem jelentkezik az ugyancsak a csoportozhoz tartozó Hg-kalkogenidek között.

A II—VI vegyületek még 20 éve is a szilárdtest kutatás és alkalmazás egyik legperspektivikusabb családjának tűntek. 1960 körül mind az ipari, mind a kutatási prognózisok döntő része az elemi félvezetőkkel azonos alkalmazási szélességet és fejlődést jósolt — különösen a ZnS tömeges alkalmazását várták, — ezek a prognózisok azonban nem váltak be. Az alkalmazás fő akadályai között a legfontosabbak: csak igen kevés II—VI mutat bipoláris vezetést, általában magas az olvadáspontjuk és az op. környékén nagy a gőznyomásuk, valamint igen rosszul adalékolhatók idegen anyagokkal. Különösen súlyos a bipoláris vezetés hiánya; e miatt nem állíthatók elő $p-n$ átmenetek, melyek a bipoláris mikroelektronikai eszközök alapelemei. Csupán az alacsony olvadáspontú CdTe adalékolható kielégítő szintig p és n típusúra, 1960—70 körül óriási erőfeszítések történtek a ZnS bipoláris vezetésének létrehozására, mivel a ZnS lumineszcens tulajdonságai alapján várható volt, hogy rendkívüli, magas felületi fényességek állíthatók elő injekciós rekombinációs mechanizmussal. Ezek a kísérletek, hasonlóan más II—VI-on folytatott kísérletekhez, lényegében eredménytelenek maradtak, bár egyes becslések szerint mind anyagi ráfordítások, mind a lekötött szellemi kapacitás tekintetében összemérhetőek a fénydiódák és félvezető lézerek kifejlesztésére fordított erőfeszítésekkel.

A bipoláris vezetés hiánya nincs kielégítően értelmezve, okait a mai napig nem tisztázták megnyugtatóan. A lehetséges okok között a legvalószínűbb, hogy az adalékok hatását intrinszc ponthibák kompenzálják, és hogy a kisebbségi donor vagy akceptor-nívó ionizációs energiája igen nagy, $>0,6$ eV. Hozzájárul a nehézségekhez, hogy az adalékok oldhatósága igen alacsony. Nagyon a technológiai nehézségek is, mivel az

III. TÁBLÁZAT
II—VI vegyületek és tulajdonságaik

Vegyület	Szerkezet	Kötéstáv d_{AB} (nm)	Rácsállandó (nm)		Tiltott sáv (eV) 300 K	m_e^*/m^0	m_h^*/m_0	μ_e (300 K) μ_h (cm ² /Vsec)	Olvadáspont (°C)
			a	c					
ZnS	szfalerit	0,234	0,54093		3,67			140—	
	wurtzit		0,382	0,6260	3,54	0,27	0,58	1000	1830
ZnSe	szfalerit	0,245	0,56687		2,58	0,17	0,60	100—	1515
	wurtzit		0,4003	0,6540	—			530	
ZnTe	szfalerit	0,264	0,61037		2,26				
	wurtzit		0,427	0,699	—	—	0,60	100—300	1295
CdS	szfalerit	0,252	0,5820		—				
	wurtzit		0,41368	0,67163	2,40	0,27	5,0	200—1400	
CdSe	szfalerit	0,262	0,605		1,67			15	1750
	wurtzit		0,42985	0,20150	1,74	0,13	1,0	500—650	
CdTe	szfalerit	0,280	0,6481		1,47			—	1258
	wurtzit		0,457	1,048	—	0,096	0,35	650—1200	1098
HgS	szfalerit	0,253	0,5851	—	2,0				1450
HgSe	szfalerit	0,263	0,6084	—	0,6				800
HgTe	szfalerit	0,280	0,6460	—	0,02				670

olvadáspontok magasak, az olvadékok az op-n gyakran bomlanak és igen agresszívek, ezért általában gőzfázisú technológiákat használnak. Csúpan a legutóbbi időkben sikerült megfelelő méretű és minőségű kristályokat előállítani. Így pl. a Raytheon cég optikai ablak célokra állított elő igen jó minőségű ZnS egykristályokat CVD módszerrel [22] és nagynyomású Stockbarger módszert is eredményesen alkalmaztak II—VI kristályok növesztésére [23]. A II—VI-okból képezhető pszeudo-biner vegyületeknek, az $A^{II}B_x^{VI}C_{1-x}^{VI}$ és $A_x^{II}B_{1-x}^{II}C^{VI}$ típusú ternéreknek kisebb a gyakorlati jelentősége. Korábban a ZnCdS-t katódlumineszcens anyagként, a MgCdTe-t kék fénydiódák anyagként használták fel.

3.2 Biner III—V vegyületek

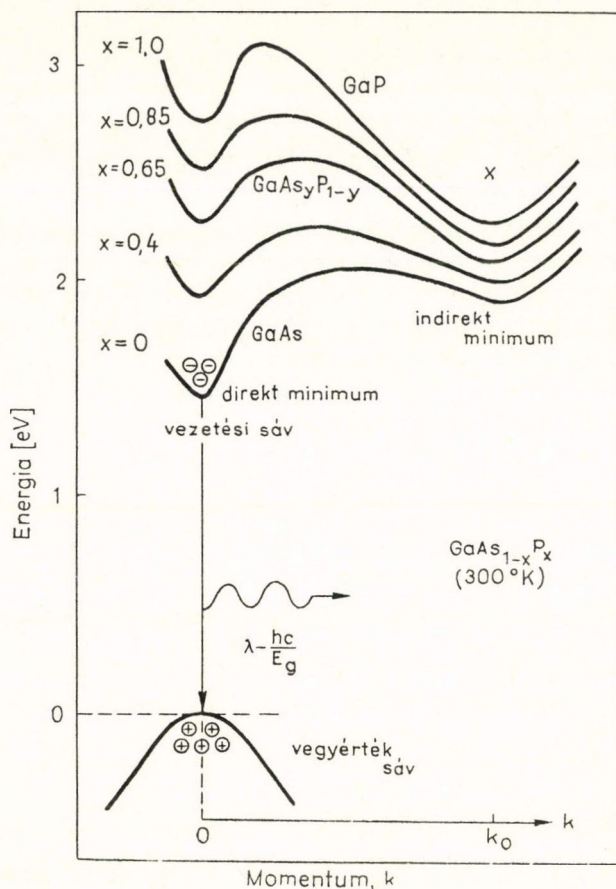
A III—V vegyületek kutatása később indult, mint a II—VI-oké. Ezek az anyagok nem fordulnak elő a természetben, mint pl. a ZnS ásványok, sok tagjukat csak néhány évtizede ismerjük. Lényeges előnyeik vannak a többi, 8-elektronos vegyülethez képest. Bipoláris vezetők, azaz $p-n$ átmenet előállítására alkalmasak. Az elemi félvezetőkkel szemben számos tagjuk direkt sávszerkezetű, ami jó hatásfokú rekombinációt tesz lehetővé. Töltéshordozó mozgékonyaságuk általában nagy, mint az a IV. táblázatban látható. Széles, az infravöröstől a látható (zöld) tartományig terjedő energiasávot fog át tiltott sávjuk. Egymással alkotott ötvözeteikben fizikai tulajdonságaik nagy része az összetétellel közel lineárisan változik (Vegard-törvény), azaz egy-egy funkcióhoz nagy szabadsággal tudunk válogatni közöttük, a megoldandó feladatnak megfelelően. Eltekintve a nitridektől és a boridoktól, melyek kémiai kötésük és szerkezetük szempontjából is jelentősen különböznek, a csoporthoz rendszerint csak a III. oszlop Al, Ga és In, az V. oszlop P, As és Sb vegyületeit számítják. A fenti elemekből létrejövő 9 binér, 18 ternér és 15 kvaterner vegyület az, melyet a III—V csoporthoz sorolnak. Ezeknek a vegyületeknek a sávszerkezetére jellemző a GaAs (direkt sávú rendszer) és a GaP (indirekt sávú rendszer) példája, melyet a 6. ábrán mutatunk be. A két biner tetszőleges arányban elegyedik egymással GaP_yAs_{1-y} összetételű ($0 < y < 1,0$) ternért alkotva, melynek sávszerkezete és egyéb fizikai állandói (pl. a rácsállandója) közel lineárisan változik az összetétellel. Magát a sávszerkezetet — mivel a vegyértéksáv csaknem minden III—V-ben nagyon hasonló — a vezetési sáv szerkezete határozza meg, melyre néhány adatot az V. táblázatban mutatunk be [47].

A fenti vegyületcsalád egyik fontos jellemzője, hogy több tagja igen nagy töltéshordozó mozgékonyaságot mutat. Welker a háború utáni években éppen a Ge-ban mutakozó elektronmozgékonyasággal foglalkozva jutott arra a gondolatra, hogy a nagy mozgékonyaság a kémiai kötéssel áll kapcsolatban. Hasonló kötés — és ezzel együtt mozgékony töltéshordozók — várható a tetraéderes kötéstípusnál, az akkor már ismert GaAs, AlSb és InP esetén, melyek kristályszerkezete hasonló a Ge-hoz. Welker kutatásaihoz, melyek során tisztázni kívánta, hogy a fenti intermetallikumok valóban félvezetők-e, a legnagyobb lökést Pauling könyve, a "The Nature of the Chemical Bond" [14] adta a rezonancia elvvel. A rezonancia elv értelmében egy kémiai vegyület stabilizációját kovalens és ionos kötésszerkezet szuperpozíciója a rezonancia-energia járulékával tovább stabilizálja. Ez azzal jár, hogy nő az olvadáspont és a tiltott sáv is a megfelelő elemhez képest, azaz ha a szürke ön félvezető, még inkább annak kell lennie az izoelektronos InSb-nak a 7. ábrának megfelelően. Az ólom mindig fém, ezért a BiTe ötvözetétől a fentiek alapján nem várható félvezető viselkedés.

IV. TÁBLÁZAT
III—V vegyületek és tulajdonságaik

Vegyület	Kötéstáv d_{AB} (nm)	Rácsállandó (nm)	Tiltott sáv 300 K (eV)	Effektív tömeg		μ_e (300 K) μ_h (cm ² /Vsec)		Olvadás- pont (°C)
				m_e	m_h			
Ge	0,2454	0,5667	0,67	0,08	0,043 (0,36)	3500—4900	3500	941
Si	0,2351	0,5420	1,107	1,18	0,81	1300—1500	500	1420
AlP	0,2367	0,5430	2,45	—	—	500		2000
AlAs	0,2450	0,563	2,16	0,11	0,22			1740
AlSb	0,2660	0,6136	1,60	0,39	0,11	50		1060
GaP	0,2380	0,5497	2,26	0,35	0,14 (0,86)	110	75	1465
GaAs	0,2448	0,5653	1,44	0,0648	0,082 (0,45)	8500	420	1237
GaSb	0,2657	0,6096	0,79	0,049	0,056 (0,33)	4000—5000	1400	712
InP	0,2543	0,5873	1,26	0,077	0,8	4000—4500	150	1070
InAs	0,2623	0,6058	0,36	0,027	0,024 (0,41)	30 000—33 000	460	942
InSb	0,2805	0,6479	0,18	0,0135	0,016 (0,44)	78 000	750	525

(A zárójelbe tett effektív tömeg az ún. „nehéz” lyukak tömege.)

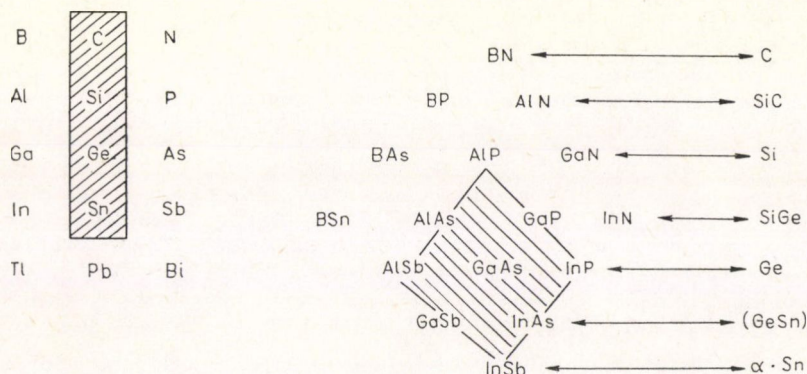


6. ábra. Direkt sávszerkezetű GaAs, indirekt sávszerkezetű GaP és a $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ ternér sávszerkezete

V. TÁBLÁZAT

III—V vegyületek sávszerkezeti adatai

Vegyület	Vezetési sáv minimum (eV)		
	Γ	X	L
AlP	3,6	2,45	(4,4—5,3)
AlAs	2,95	2,16	(2,5)
GaP	2,78	2,26	2,7
GaAs	1,44	1,92	2,01
InP	1,35	2,30	1,95
InAs	0,36	1,8	1,2



7. ábra. Elemi félvezetők, és a hasonló szerkezetű izoelektronos vegyületek

Welker 1951-ben kezdte meg kísérleti munkáját InSb szintézisével a Trendelenburg által vezetett Siemens Laboratóriumban, Erlangenben. Vizsgálandó modellnek az InSb mellé az AlSb-t választotta. 1952 folyamán sikerült igazolni a II. és VI. oszlop elemeinek hozzáadásával Welker korábbi elképzelését az adalékolásról, és az AlSb-nál $1:10^4$ arányú egyenirányítást kaptak, az InSb-on pedig a Ge-hoz képest igen nagy ($11\,000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) elektronmozgékonytságot találtak. Már az első eredmények is nagy feltűnést keltettek, 1952-ben Bell-kutatók, köztük Schockley is meglátogatta a Siemens-laboratóriumot. Welkert meghívták az USA-ba, ahol megismerte az elemi félvezetőkire kidolgozott zónázási technikát, és 1953-ban, zónázott InSb-on már $76\,000$ -es elektromozgékonytságot mértek. Egymás után jelentek meg a közlemények; optikai módszerrel meghatározták előbb az InSb [24], majd az InAs, InP, GaAs és GaP tiltott sávját [25]. A washingtoni National Bureau of Standards-ben felfedezték az InSb új félvezető tulajdonságait [26] és a Battelle Memorial Instituteban is az AlSb félvezető vonásait vizsgálták [27]. A Szovjetunióban is intenzív munka folyt a III—V területen, melyet Nasledov 1956-ban, az IUPAP 3. félvezető konferenciáján (Garmisch) ismertetett. Gorjunova 1950-ben a Joffe Intézetben szintén felfedezte az α -Sn InSb analógiát és 1952-ben Blum, Mohrovskij és Regel az InSb félvezető vonásait is kimutatta, de az extrém tulajdonságokat nem vették észre.

Az első nagyobb III—V kristályokat, InAs-t és GaAs-t 1954-ben állították elő [28], és egy éven belül megvalósították a $p-n$ átmenetet is [29]. A tiszta polikristályos GaP-t ugyancsak Welkerék szintetizálták 1955-ben, és Wolf munkatársaival az USA-ban még abban az évben kimutatta az anyag elektrolumineszcenciáját [30]. A lumineszcens kutatásokat az tette lehetővé, hogy az említett együttes felfedezte az olvadékolatból történő kristálynövesztést, melynek segítségével GaP, GaSb és GaAs egykristályokat állítottak elő Ga olvadékból [31]. Az első III—V ternékeket, az InAsP-ot és GaAsP-t Folberth állította elő csaknem azonos időben [32], felismerve, hogy a fizikai és kémiai tulajdonságok változtathatók az összetétellel. A vegyületcsalád gyakorlati felhasználása is a Siemens-től indult el; InSb-ból mágneses tér által vezérelt eszközöket állítottak elő. Az első, mai értelemben is használható eszközt Weiss munkája nyomán dolgozták ki InSb—NiSb eutektikum felhasználásával [33—35]. 1964-ben már 1000 -t meghaladta a III—V anyagról közölt dolgozatok száma, ezek között megtalálhatjuk az első felszigetelő kristályokra (GaAs és InP) vonatkozó

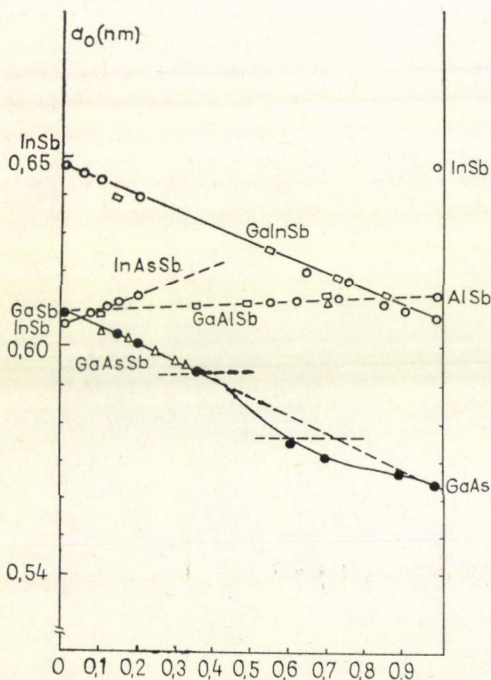
adatokat épp úgy, mint a védőolvadékos (LEC-liquid encapsulation Czochralski) egykristályhúzást (Royal Radar Establishment, Anglia) és az első, gőzfázisú epitaxiás módszerek leírását [36, 37].

Ez a szám ma már a területre vonatkozó, éves adatoknak sem felel meg, olyan gyors a növekedés. A lassan klasszikussá váló félvezető struktúrák és alkalmazások mellett egyre újabb és újabb, az elemi félvezetőkkel nem rokonítható területek jelentkeznek. 1963-ban Gunn felfedezte, hogy a direkt sávú GaAs-ben mikrohullámú oszcilláció idézhető elő [38]. Az elektronoknak a nagy mozgékonyaságú Γ -völgyből történő átszóródása a kis mozgékonyaságú mellékvölgybe negatív differenciális mozgékonyaságot hoz létre, ez teszi lehetővé a jelenséget, melyen egy új eszköz, a Gunn-dióda alapul [39]. Ez, a Si és Ge sávszerkezete miatt elemi félvezetőkkel nem hozható létre. Hasonló a helyzet az optikai eszközök terén is. Bár az elektron-lyuk rekombinációs sugárzást az elemi félvezetőkön fedezték fel [40], ezek indirekt sáv szerkezete nem teszi lehetővé jó hatásfokú félvezető fényforrások előállítását. Az ötvenes évek közepe táján, mikor már általánosan is ismertté vált, hogy a ZnS-nál fellépő nehézségek nem hidalhatók át, a kutatás súlypontja a III—V területre tolódott át. Két, független központ alakult ki. Az RCA laboratóriumaiban a ZnS:Cu analógia miatt, a Bell Laboratóriumban az elemi félvezetőkhez hasonló sáv szerkezete miatt kezdtek foglalkozni a GaP:Zn rendszerrel. Az első összefoglaló a III—V elektroluminiscens kutatásokról 1955-ben jelent meg [41], határozottan a ZnS-nál megíúsulni látszó, lapos tv-képcső és kijelző pótlására tett erőfeszítésekkel. A Bell Laboratóriumban Gershenzon és munkatársai, az RCA-nál Loebner és csoportja indult nagy lendülettel ebbe az irányba, mely 10 év múlva a fénydiódák (LED-light emitting diode) ipari tömeggyártásához vezetett. A kutatás súlypontja egyre inkább áttolódott Európából a nagy amerikai vállalatok kutatólaboratóriumaiba. Tovább szélesítette a lehetőségeket, hogy Keyes és Quist 1961-ben felfedezte a GaAs nagy hatásfokú emisszióját [42]. A később Nobel-díjjal kitüntetett Baszov és munkatársai a Szovjet Tudományos Akadémia Lebegyevről elnevezett Fizikai Intézetében már 1961-ben leírták, hogy a félvezető $p-n$ átmeneten megfelelően nagy töltéssűrűség esetén koherens emisszió léphet fel [43]. Történeti érdekesség, hogy Baszov közvetlen munkatársa, O. N. Krokhin egy hazánkban, 1961-ben Balatonvilágoson tartott szimpózium alkalmával is ismertette a lézerdióda elvét. A megvalósítás sem váratott magára, már 1962-ben több amerikai kutatócsoport bejelentette, hogy koherens sugárzást észlelt alacsony hőmérsékletű GaAs diódákon [44—46], és ezzel megindult a félvezető lézerek fejlesztése is, melynek eredményeként ma már számos, gyakorlatilag is döntő fontosságú területen, pl. az optikai híradástechnikában alapvető szerepet kaptak. A lézerdiódákkal együtt megindult a gyors detektorok fejlesztése is, és ma már a legkülönbözőbb fotoellenállás, fotodióda és -tranzistor konstrukció ismert széles hullámhossz tartományra. Új, és igen nagy perspektívájú terület nyílt meg az áramkör tervezésben is, mivel a GaAs-ban az elektron mozgékonyaság lényegesen meghaladja a Si-ben elérhető értékeket. Ez nagyobb frekvenciák felé tolja ki az áramkörök működési lehetőségeit. Az első, GaAs alapú integrált áramkör — egy 4 GHz-es órafrekvenciájú frekvenciaosztó — 1974-ben jelent meg. 1981 elején már 1008 kaput és több mint 6000 tranzisztort tartalmazó LSI áramkör is ismert volt, melyben az elemsűrűség elérte a 10^5 cm^{-2} -t.

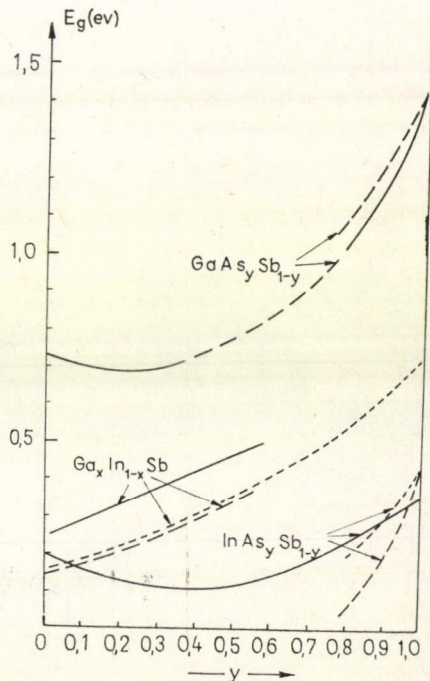
3.3 Ternér vegyületek

A három, különböző atomfajtát tartalmazó félvezető vegyületeknek számos változata lehetséges, melyekre az előzőekben már több példát mutattunk. Gyakorlatilag és elméletileg a fenti csoportból csupán a III—V és a II—IV—V₂ típusú anyagok fontosak, ezért részletesen csak ezekre térünk ki. A III—V ternérek félvezető tulajdonságok szempontjából azonosak a binerekkel: vezetésük bipoláris, szfalerit szerkezetűek, mozgékonyág, tiltott sáv, rácsállandó, stb. tulajdonságaik lineáris interpolációval közelíthetőek a biner alkotók tulajdonságaiból. Ez a lehetőség a fizikai tulajdonságok széles skálán történő változtatását teszi lehetővé, ami eszköztervezés szempontjából rendkívül előnyös. Négykomponensűeknél egy újabb szabadsági fokkal rendelkezünk; míg a ternéreknél az összetétellel állíthatók be bizonyos fizikai jellemzők (sávszélesség, rácsállandó), addig kvaternér vegyületeknél egy-egy rácsállandó vagy tiltott sáv értékéhez széles összetétel tartomány rendelhető.

Ha a félvezető szempontból fontos 6 elemet vesszük tekintetbe (Al, Ga, In és P, As, Sb) 18 különböző ternér kombináció lehetséges, melyek tagjait a VI. táblázatban tüntettük fel. Ezekre az anyagokra a Vegard-szabály jól teljesül, a rácsállandóknál ez pl. bemutatható a ternér antimonidok esetén (8. ábra). A sávszélesség változása már nem követi ilyen jól a linearitást, és a tiltott sáv változása az összetétellel négyzetes



8. ábra. Rácsállandó változása A^{III}B^V ternér antimonidokban az összetétel függvényében



9. ábra. Tiltott sáv értékének változása az összetétel függvényében III—V ternér antimonidokban

VI. TÁBLÁZAT
III—V ternér vegyületek tulajdonságai

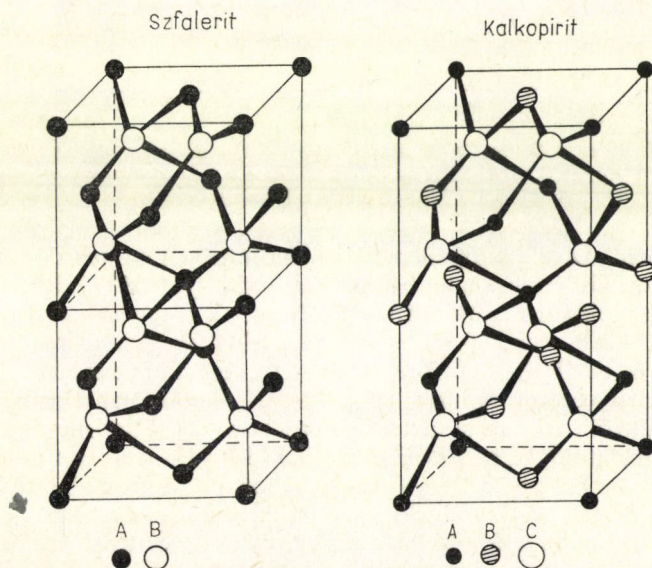
Vegyület	Tilos sáv jellege	E_g (eV)	Direkt-indirekt átmenet (X_c)	Görbületi paraméter		
				Γ	X	L
$Ga_xIn_{1-x}P$	d/i	1,35—2,26	0,73 (0,6—0,8)	0,786	0,205	0,86
$Al_xIn_{1-x}P$	d/i	1,35—2,41	0,44	0	0	—
$Al_xGa_{1-x}P$	i/i	2,26—2,41	—	—	0	—
$Ga_xIn_{1-x}As$	d/d	0,36—1,45	—	0,61	—	0,5
$Al_xIn_{1-x}As$	d/i	0,36—2,15	0,68	0,23	—	—
$Al_xGa_{1-x}As$	d/i	1,43—2,15	0,36 (0,3—0,44)	0,4	0,07	0,45
$Ga_xIn_{1-x}Sb$	d/d	0,18—0,72	—	0,41	—	0,33
$Al_xIn_{1-x}Sb$	d/i	0,18—1,72	0,8	0,43	—	0,35
$Al_xGa_{1-x}Sb$	d/i	0,72—1,65	0,40 (0,35—0,40)	0,69	0,55	0,3
$AlAs_xP_{1-x}$	i/i	2,15—2,41	—	—	—	—
AlP_xSb_{1-x}	i/i	1,65—2,41	—	—	—	—
$AlAs_xSb_{1-x}$	i/i	1,65—2,15	—	—	—	—
$GaAs_xP_{1-x}$	d/i	1,43—2,26	0,46 (0,38—0,51)	0,21	0,21	0,25
GaP_xSb_{1-x}	d/i	0,72—2,26	0,71	2,0	—	—
$GaAs_xSb_{1-x}$	d/d	0,72—1,43	—	1,2	—	—
InP_xAs_{1-x}	d/d	0,36—1,35	—	0,36	—	0,26
$InAs_xP_{1-x}$	d/d	0,18—0,36	—	0,6	—	—
InP_xSb_{1-x}	d/d	0,18—1,35	—	2,0	—	0,55

tagot is tartalmaz az

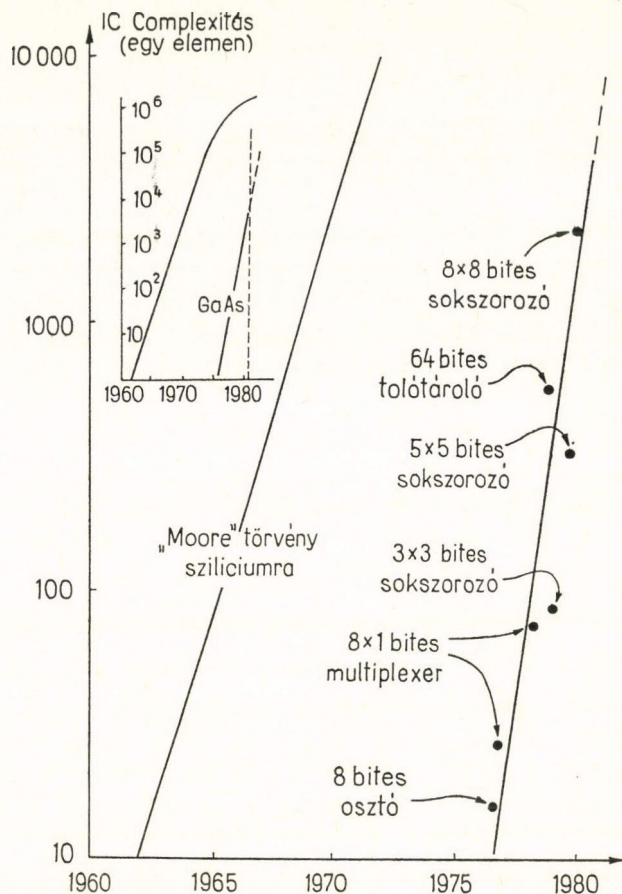
$$E_i(x) = xE_i^{AC} + (1-x)E_i^{BC} - x(1-x)C_i \quad (11)$$

egyenletnek megfelelően, ahol az i index az egyes sávminimumokat (Γ , X és L) jelöli, és a c állandó az ún. görbületi (bowing) paraméter, mely a többkomponensű (ternér és kvaternér) II—VI és III—V vegyületekre jellemző. A 9. ábra ugyancsak antimonidok esetére a tiltott sáv, E_g értékének kísérletileg meghatározott összetétel-függését mutatja, de hasonló menetet mutatnak a többi ternérek is.

Eltérő ternér típusnak felelnek meg az $A^I B^{III} C_2^{VI}$ és $A^{II} B^{IV} C_2^V$ típusú vegyületek, melyeket a 8 elektronos struktúráknál már bemutattunk. Ezek a II—VI és III—V vegyületekből vezethetők le, helyettesítve a II(b) ill. a III. oszlop kationját azonos számú I(b) és III., ill. II(b) és IV. oszlophoz tartozó kationnal. Az ilyen szubsztitúció egy harmadik félvezető generációt ad a 10. ábrának megfelelően. Az I—III—VI₂ vegyületek 18 tagja ismert, ezeket a megfelelő elemek (Cu, Ag, Al, Ga, In, S, Se, Te) kombinációival nyerhetjük. A II—IV—V₂ vegyületekhez az oxid és nitrid származékokat nem sorolják be a rács, ill. a kémiai kötés ionicitása miatt. Az ismert vegyületek a Zn, Cd, Si, Ge, Sn, P és As kombinációi közül kerülnek ki (antimonidokról nincsenek ismeretek). Az utóbbi anyagok kalkopirit rácsban kristályosodnak, mely tetragonális szuperrácsa a szfaleritnak [48]. A kristályrácsban a kétféle, II és IV oszlophoz tartozó kation tetragonálisan torzult tetraéderben koordinálja az anionokat, ezért a szimmetria alacsonyabb a kationhelyek szimmetriájánál. Az elemi cella durván a szfalerit $\langle 100 \rangle$ irányú megduplázása útján jön létre a 11. ábrának megfelelően, azaz a kitüntetett irány a tetragonális c -tengely. Ezekben az anyagokban n -típusú vezetés hozható létre Se és Te adalékkal. Hasonló tulajdonságú donorok a III. oszlop elemei II(b) helyeken ülve, de akceptorként viselkednek, ha a IV. oszlop kationját helyettesítik. Hasonló, amfoter viselkedést mutat pl. Si a III—V anyagokban kation



10. ábra. Szfalerit és kalkopirit rács összehasonlítása



11. ábra. A Si és GaAs alapú eszközökben integrált elemek számának növekedése az elmúlt években. (A Si-eszközök komplexitása 1981-re elérte a 10⁶/elem értéket)

ill. anion alrácásban. Az V. oszlop elemei IV. kationhelyen szintén donorként viselkednek. Lyukvezetés is létrehozható, ha II(b) kationt helyettesítünk I(b) elemmel, pl. Cu-vel. Ilyen anyagokban negatív ellenállás, és ennek megfelelően Gunn dióda is kialakítható pl. CdSnP₂-ben [49]. A $p-n$ átmeneteken sugárzásos rekombinációval infravörös fény is előállítható InP-re növesztett heteroátmeneteken. Mivel ezen anyagok is bipolaris vezetők és tiltott sávjuk a VII. táblázatnak megfelelően széles tartományban változik, számos területen ígéretes anyagok. Elterjedésüket az előállításuknál fellépő technológiai nehézségek gátolják. Mivel a szerkezet csak kissé torzult, a sáv szerkezet is hasonló a III—V analógokhoz, bár a sáv szerkezet jellege néha megváltozik. A ZnGeP₂ pl. az indirekt GaP-ból vezethető le, ennek ellenére direkt anyag. Hasonló sáv szerkezetű a ZnSiAs₂; ZnSiP₂ és CdSiP₂ is. Ezeket „pseudo-direkt” anyagoknak nevezik [50], mivel a sáv szerkezet változását a II(b) és IV. kationok közötti effektív töltés és kovalens sugárkülönbség hozza létre.

VII. TÁBLÁZAT

 $A^{IV}B^{IV}C_2^V$ típusú vegyületek és analógjaik

Vegyület	Tiltott sáv (eV)	III—V analóg	Tiltott sáv (eV)
ZnSiP ₂	2,96	GaAlP	2,35
CdSiP ₂	2,45	InAlP	2,25
ZnGeP ₂	2,34	GaP	2,26
ZnSiAs ₂	2,12	GaAlAs	2,01
CdGeP ₂	1,72	InGaP	1,87
ZnSnP ₂	1,66	InGaP	1,87
CdSiAs ₂	1,55	InAlAs	1,60
CdSnP ₂	1,17	InP	1,26
ZnGeAs ₂	1,15	GaAs	1,44
ZnSnAs ₂	0,73	InGaAs	0,82
CdGeAs ₂	0,57	InGaAs	0,82
CdSnAs ₂	0,26	InAs	0,36

VIII. TÁBLÁZAT

I—III—VI₂ vegyületek és analógjaik

Vegyület	Tiltott sáv (eV)	II—VI analóg	Tiltott sáv (eV)
CuAlS ₂	3,49		
AgGaS ₂	2,73	ZnCdS	3,17
CuGaS ₂	2,43	ZnS	3,67
AgInS ₂	1,97	CdS	2,4
AgGeS ₂	1,83	ZnCdSe	2,33
CuGaSe ₂	1,68	ZnSe	2,58
AgInS ₂	1,24	CdSe	1,75
CuInSe ₂	1,04	ZnCdSe	2,33

Az I—III—VI₂ vegyületek között a Cu vegyületek S és Se adalékkal *p*-típusúvá tehetők, *n*-típusosság valószínűleg önkompenzáció miatt nem jön létre III helyen szubsztituált II(b) elemekkel. Lehetséges donorok a IV és VII elemek III., ill VI. helyeken, ezek tulajdonságait azonban alig vizsgálták. Az alapvegyületeket és homológjaikat a VIII. táblázatban gyűjtöttük össze. Ezen anyagok domináns lyuk vezetése azért érdekes, mert a II—VI analógok *n*-típusúak. Érdekes alkalmazás ilyen rendszerek heteroátmeneteinek kialakítása; ilyen pl. az *n*—CdS/*p*—CuGeS₂, mely nyitóirányban zöld fényt emittál [51]. A II—VI-okhoz képest tapasztalt eltolódás valószínűleg a *d*-héjak szerepének növekedésével hozható kapcsolatba.

4. Alkalmazások, és ezek távlatai

Ma már az elektronika kőkorszakának számít a vákuumcsövek kora, és a fejlődés töretlenül folytatódik a szilárdtest eszközök területén. Néhány éve a prognózisok kivétel nélkül telítési görbékét javasoltak az elektronika minden ágára; az alkalmazások körében épp úgy, mint az elemsűrűség vagy más paraméterek területén. Ezek a jóslatok egyelőre nem teljesülnek, a verseny a diszkrét és integrált eszközök, bipoláris

és MOS eszközök, az LSI és VLSI eszközök, stb. között kíméletlen motorja a technikai haladásnak. Ebben a versenyben számos faktor határozza meg, hogy egy-egy terület milyen irányba fejlődik tovább. Az egyik ilyen tényező az alapanyag ára. Ebben a tekintetben a Si számos előnnyel rendelkezik; gyakorlatilag nincs olyan félvezető vegyület, amelyik versenyképes lenne vele. Noha számos területen a GaAs pl. azonosan alkalmazható a Si-al, ára miatt nem jöhet számításba. Lényeges szempont a technológia fejlesztés költsége is, ez pl. az egyik — jelenleg szinte áthidalhatatlan gát — mely a molekulásugaras epitaxiával (MBE — molecular beam epitaxy) készült eszközök elterjedésének útjában áll. Fontos szempont a kifejlesztett eszköz sokoldalúsága is, a Si-eszközök ebből a szempontból is előnyt élveznek, hiszen a vegyület-félvezetők közül készült eszközök alkalmazása egy-egy speciális területre korlátozódik. Ez a sokoldalúság nem csak az eszköz vonatkozásában merül fel, hanem magával az anyaggal szemben is követelmény. Ez az a terület pl., ahol a GaAs már lényegesen jobb a Si-nál, hiszen a klasszikus elektronika elemei épp úgy felépíthetők belőle, mint az optoelektronika vagy a mikrohullámú (nagyfrekvenciás) eszközök, melyek Si-ból nem alakíthatók ki. Ugyancsak ez az a szempont, mely a GaAs-et megkülönbözteti az összes többi félvezető vegyülettől. A fenti szempontok érvényesülése alakította ki azokat az alkalmazásokat, melyeket a IX. táblázatba foglaltunk össze. Ebben nem a laboratóriumi, hanem az ipari alkalmazások találhatók. Jól látható, hogy a GaAs a gyakorlati alkalmazás valamennyi területén megtalálható, és pillanatnyilag a legsokoldalúbb félvezető anyag. Termelése 1980-ban már meghaladta az évi 20 tonnát (egykristályból!) és a védőolvadékos (LEC — liquid encapsulated Czochralski) húzással előállított kristályok átmérője elérte a 70 mm-t. Míg a 80-as évekig legnagyobb mennyiségét a vörös GaAsP fénydiódák hordozókristályaként használták, a felhasználás 1980. után egyre inkább a mikrohullámú alkalmazások; MESFET-ek és integrált áramkörök, valamint a varaktorok irányába tolódik el. Ezek viszonylag nagyfelületű kristálylapkákat igényelnek, ezért az említett mikroelektronikai elemek rohamos terjedésével egyre nő a jó minőségű GaAs iránti piaci igény.

A jelenlegi műszaki-tudományos ismeretek alapján a fenti terület mellett jelentős fejlődés várható az energiatermelésben is. A félvezető napelemekre végzett optimumszámítások azt mutatják, hogy 1,3—1,5 eV közé eső tiltott sávú anyagok felhasználása látszik előnyösnek a napenergia hasznosításában. (A fotoelektromos hatás következtében létrejövő fotofeszültség a tiltott sávval együtt nő, de a párkeltéshez szükséges fotoenergia is nő, ezért a két paraméter együtt határozza meg az optimumot.) Mivel a Si tilos sávja csak 1,1 eV, nem optimális fizikai paramétereit tekintve, de olcsósága és aránylag könnyű eszköztechnológiája miatt a jelenleg felhasznált napelemek döntő többsége Si-alapú. A Si ipari napelemek hatásfoka 15% (az elméleti ~20%) segítségével 25—30 mA/cm² áram nyerhető.

Lényegesen jobb adatok nyerhetők a GaAs-el és a CdTe-al, melyek tilos sávja alkalmasabb (I. III. és IV. táblázatok). A GaAs-nél 22%-os hatásfokot mértek, az elméleti 25—28%. Hasonló, kissé magasabb érték várható a CdTe-ra. Tovább növelhető a hasznosítás, ha olyan változó (graded) tiltott sávú heteroátmeneteket használunk, melyek a Nap-spektrum jelentős részét hasznosítják. Ilyen GaAs—GaAlAs rendszereket dolgoztak ki *Alferov* vezetésével a Szovjet Tudományos Akadémia Joffe Intézetében. Ezeknek a napelemeknek az elterjedését jelenleg magas árak korlátozza, de az ár csökkenésével egyre versenyképesebbé válnak.

Lényegesen előbbre tart az optoelektronikai elemek térhódítása. Az optikai hír-

IX. TÁBLÁZAT
Félvezető vegyületek gyakorlati alkalmazásai

A felhasznált fizikai jelenség	Alkalmazás	Félvezető vegyület
Nagy elektron-mozgékonyság	Nagyfrekvenciás tranzisztorok és integrált áramkörök (MESFET-ek és IC-k)	GaAs, InP, InGaAs
Forró elektronok sávközi átmenetei a vezetési sávban (Gunn-effektus)	Nagyfrekvenciás (mikrohullámú) jelgenerálás és erősítés (Gunn-diódák)	GaAs, InP
Töltésgeneráció ütközési ionizációval (lavina-effektus)	Nagyfrekvenciás jelgenerálás és erősítés (IMPATT diódák)	GaAs
Feszültségfüggő tértöltési tartomány ill. kapacitás $p-n$ átmeneten	Frekvenciasokszorozás, parametrikus hangolás (varaktorok, stb.)	GaAs
Piezoelektromos effektus	Elektroakusztikus erősítés, késleltető vonalak	GaAs
Sugárzásos rekombináció $p-n$ átmeneten	Koherens és spontán fénygeneráció (lézerek és fénydiódák)	GaAs, GaAlAs, GaAsP, GaInAsP, GaAsSb ill. GaAs, GaP, GaAsP, GaAlAs, SiC, ZnSe, PbS, stb.
Párképződés fényabszorpcióval $p-n$ átmeneten	Foton detektálás és sugárzási energia hasznosítása (fénydetektorok és napelemek)	GaAs, GaSb, InSb, InAs, InGaAs, InGaAsP, GaAsP, GaAlAs, stb.

adástechnika a kisveszteségű optikai kábelek kifejlesztése óta rohamosan terjed. Az USA-ban számos helyi és városok közötti telefonkapcsolatot építettek ki, és az ugyancsak rohamosan terjedő, vezetékes tv-hálózat egy része is optikai kapcsolattal működik. Európa több mint tíz országában működnek kísérleti, vagy rendeltetés-szerűen üzemeltetett optikai híradástechnikai rendszerek. Ezekben a rendszerekben a jelátalakító félvezető fényforrás: lézer vagy fénydióda. A lézerek előállítása nehezebb és költségei is magasabbak, de nagy a kilépő teljesítmény (~ 2 mW) és a sugárzás irányítottasága miatt a szálba történő energia-beecsatolás is jobb hatásfokú. A lézer keskeny hullámhossz-sávban sugároz, ezért a jel diszperziója kicsi, és az eszköz 1000 megabit/sec fölött is használható. Hátrány viszont, hogy különleges meghajtást igényel, és kisebb a megbízhatósága is. A fénydiódák (LED-ek) olcsóbbak, előállítási technológiájuk lényegesen egyszerűbb, de az emisszió sávja széles, és a sugárzás nem, vagy csak alig irányított. A széles emissziós sáv miatt romlik az átadás, a jel diszperziója nő. A LED meghajtása egyszerű, de 200 megabit/sec felett nem használható. A fenti tulajdonságok miatt a LED-ek rövid, a lézerek elsősorban hosszútávú hírközlésre alkalmasak. Jelenleg a hosszabb ($\lambda > 1 \mu\text{m}$) hullámhosszúságú fényforrások fejlesztése és gyártásának megindítása folyik. A GaAlAs—GaAs lézerek sugárzása ui. nem esik egybe az optikai kábelek veszteség-minimumával, ezért célszerűnek látszik a szálhoz illesztett, 1,3—1,5 μm -en sugárzó fényforrások kifejlesztése. Ezek új anyagokból: GaInAsP-ből vagy GaAlAsSb-ből alakíthatóak ki. A technológiai színvonal már ezen a területen is elérte a gyakorlati alkalmazás szintjét. A hosszúhullámú lézerek megbízhatósági és teljesítményszintjére jellemző, hogy jelenleg az Atlanti Óceán alatti telefonkábel kiváltásán dolgoznak; az optikai kábel ui. lényegesen ellenállóbb korróciónak, mint a klasszikus telefonkábel, ua. súlya csak tört része a fémkábelnek. A hosszabb hullámhossz a fényforrás mellett a vevőoldalon is problémát jelent; 1,3 μm -nél ui. a Si elemek (lavina-, PIN dióda, stb.) már nem használhatóak. Detektorként szintén félvezető vegyületet kell használni, mely kellően gyors és megbízható. Ilyen több is van, három ill. négykomponensű III—V anyagokból számos fotó- és lavinadióda típust dolgoztak ki.

Az optoelektronikai alkalmazások közül nagy jövő jósolható a szelektív spektroszkópiának is. Mivel a II—VI és III—V vegyületek az optikai spektrum széles tartományát lefedik, az 1,3 μm -es optikai híradástechnikához hasonlóan több sávban is kiválasztható olyan lézer-detektor pár, mely egy-egy fontosabb anyag abszorpciós sávjában használható, és ezért nagyon gyors, olcsó és szelektív analitikai módszer dolgozható ki segítségükkel. A jelenlegi méretek és áramfelvétel ismeretében ezeknek a berendezéseknek a méretét a működtető áramforrás (elem vagy mikroakkumulátor) szabja meg, hasonlóan azokhoz a fénydiódás töltőtollakhoz, melyekbe óra vagy kis számológép van beépítve. Környezetszennyezési és munkavédelmi kérdések megoldásában ideális megoldást kínálnak.

A legmeredekebb fejlődés a nagyfrekvenciás, tervezérelt tranzisztorok, integrált áramkörök és memóriák terén várható. Mint láttuk, az elektronmozgékonyosság a GaAs-ben közel hatszorosa a Si-énak, ugyanakkor GaAs-ből aránylag könnyen állítható elő félszigetelő ($6\text{—}8 \cdot 10^7 \Omega\text{cm}$ ellenállású) kristály. A szigetelés és nagy elektronmozgékonyosság együtt lehetővé teszi planáris technológiák alkalmazását nagysebességű mikroelektronikai elemek előállítására. Külön ki kell emelni, hogy a mozgékonyosság alacsony hőmérsékleteken rohamosan nő (cseppfolyós nitrogén hőmérsékletén $\sim 50\,000 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$), ami további tartalékokat jelent a fejlesztésben. Kedvezőtlenebb a helyzet a lyukakkal, a lyukmozgékonyosság ui. alacsonyabb a Si-

énál. Ez a két tényező megszabja, hogy a GaAs eszközök fejlesztése elsősorban a MESFET területen várható, bipoláris eszközöknél ui., ami nyerhető a sebességben elektronmozgékonyosság miatt, az elvész a lyukaknál.

Jelenleg az elemsűrűség növekedése GaAs alapú áramkörökben meredekebben változik, mint korábban a Si-eszközöknél. A 11. ábrán bemutatott fejlődés alapján még ebben az évtizedben várható a 10^5 -es komplexitás elérése. Mivel a növekedés az $y=3^x$ egyenlettel közelíthető [52], a GaAs és Si alapú elemek bonyolultsága kb. 1990-re éri el egymást. (A Si esetén az egy áramkörben fellelhető elemek korábban évenként duplázódtak, jelenleg a folyamat lelassult és az elemszám csak kétévenként kétszereződik meg.) 1990-re amerikai előrejelzések a teljes IC piac egy jelentős részében (~ 10 –25%-ában) GaAs felhasználást prognosztizálnak, 2–5 milliárd \$ értékben. Ez már önmagában is indokoltá teszi, hogy a félvezető vegyületekkel komolyan foglalkozunk. Az 1980-ban kidolgozott 8×8 bites áramkör 6000 tranzisztort és diódát tartalmaz egy $2,25 \times 2,70$ mm-es chipen, 1983–84-re ennek jelentős növekedése és az áramkör-típusok közel négyszereződése várható. Gyors iramban fejlesztik az A/D konverter típusokat, ami jelentősen megkönnyíti az analóg jelek számítógépes feldolgozását, de ugyanakkor olyan gyors busz-rendszereket is kidolgoztak, melyek több terminálra dolgozva elsősorban fogyasztói igényeket elégítenek ki a légiközlekedésben, szállodaiparban, optikai hírközlésben, stb. Jelentős piacokat várnak az audio és videoalkalmazásoktól is.

Mindez azt jelenti, hogy a felsorolt előnyök, de különösen az igen sokoldalú felhasználás miatt a félvezető vegyületek csoportjából csaknem kizárólag a III–V típusú anyagok gyors előretörésével számolhatunk. A jelenlegi fénydióda tömeggyártás mellé, — mely egyre inkább a GaP eszközök irányába tolódik el — felzárkózik a GaAs áramköri felhasználása is. A többi anyagból, a II–VI vegyületekből és az „exotikus” III–V anyagokból előállított eszközökből elsősorban egy-egy szűk (főleg optoelektronikai) területen számíthatunk kis sorozatú gyártásra. Mindezekből az következtethető, hogy hiba lenne azt feltételezni, hogy a GaAs vagy rokonvegyületei kiszorítják a Si alapú eszközöket a mikroelektronika különböző területeiről. A Si eszközök még az ezredfordulón is a mikroelektronika döntő hányadát fogják adni. De ugyanígy hiba lenne a félvezetők ismertett csoportját valamilyen technikai kuriózumnak tekinteni, mely csak néhány, különleges feladat megvalósítására jó! A félvezető vegyületek, elsősorban a III–V vegyületek jelentős szerepet játszanak és fognak játszani a világ „elektronizálásában”. A kémiai iparban a műanyagok előretörésekor voltunk tanúi hasonló jelenségeknek a század elején. Akkor azt hitték, hogy az új anyagcsalád az ismert szerkezeti anyagok helyett kerül alkalmazásra, ezért is nevezték őket „műanyagoknak”. Az idő múlásával kiderült, hogy néhány anyag valóban helyettesíthető különféle műanyagokkal, de az új anyagok olyan csodálatos új lehetőségeket nyújtanak, melyeknek semmi közük sincs ismert anyagok helyettesítéséhez. A műanyagok megteremtették a saját, sokszor forradalmi alkalmazásait. Kissé ilyen a helyzet a félvezető vegyületekkel is. Néhány terület, elsősorban az optoelektronika és a mikrohullámú alkalmazások már fejlődésnek indultak, mások még csak most formálódnak, de szerepük, fontosságuk már most előre látható.

IRODALOM

1. J. Bardeen és W. H. Brattain, Phys. Rev. 74, 230, 1948.
2. J. Bardeen és W. H. Brattain, Phys. Rev. 75, 1208, 1949.
3. W. Shockley, Bell Syst. Tech. J. 28, 435, 1949.
4. J. L. Moll, M. Tanenbaum, J. M. Goldey és N. Holonyak, Proc. IRE 44, 1174, 1956.
5. C. J. Frosch és L. Derick, J. Electrochem. Soc. 104, 547, 1957.
6. R. D. Deslattes, A. Henins, R. M. Schoonover, C. L. Carrol és H. A. Bowman, Phys. Rev. Letters 36, 898, 1976.
7. K. H. Butler and C. W. Jerome, J. Electrochem. Soc. 97, 265, 1950.
8. G. Destriau, J. Chim. Phys. 33, 587, 1936.
9. H. K. Henisch: Electroluminescence Pergamon Press, Oxford, 1962.
10. H. Welker, Z. Naturforsch. 7a, 744, 1952.
11. H. Welker, Z. Naturforsch. 8a, 248, 1953.
12. H. A. Горюнова: Канд. диссертация, ЛГУ. 1950; H. A. Горюнова: „Сложные алмазоподобные полупроводники” Сов. радио, Москва, 1968.
13. H. G. Grimm és A. Sommerfeld, Z. Phys. 36, 53, 1926.
14. L. Pauling, The nature of the Chemical Bond. Cornell Univ. Press, Ithaca, 1960.
15. W. B. Pearson, J. Phys. Chem. Solids 23, 103, 1962.
16. J. C. Philips, Rev. Mod. Phys. 42, 317, 1970.
17. J. A. Van Vechten, Phys. Rev. 187, 1007, 1969.
18. J. C. Philips, Treatise on Solid State Chemistry. Ed. B. Hannay, Plenum Press, N. Y. 1975.
19. B. R. Pamplin, Phys. Bull. 29, 569, 1978.
20. V. M. Goldschmidt, Geochemische Verteilungsgesetze J. Dubward Verlag, Oslo, 1927.
21. O. B. Лосев, Телеграфия и телефония без проводов, 18, 45, 1923.
22. J. Pappis, B. diBenedetto és A. Swanson, Proc. 13th Symp. on Electro-Magnetic Windows. Georgia Inst. of Technol. 1976.
23. I. Kikuma és M. Furukoshi, J. Cryst. Growth 44, 467, 1978.
24. M. Tanenbaum és H. B. Briggs, Phys. Rev. 91, 1561, 1953.
25. R. G. F. Oswald és R. Schade, Z. Naturforsch. 9a, 611, 1954.
26. R. G. Beckenridge, W. R. Hosler és W. Owshinsky, Phys. Rev. 91, 243, 1953.
27. R. K. Willardson, A. C. Beer és A. E. Middleton: Electrochem. Soc. Meeting, New York, 1953.
28. R. Gremmelmaier, Z. Naturforsch. 11a, 511, 1956.
29. R. Gremmelmaier, Z. Naturforsch. 10a, 501, 1955.
30. G. A. Wolff, R. A. Hebert és J. D. Broder, Phys. Rev. 100, 1144, 1955.
31. G. A. Wolff, P. H. Keck és J. D. Broder, Electrochem. Soc. Meeting, Pittsburgh, 1955; Phys. Rev. 94, 753, 1954.
32. O. G. Folberth, Z. Naturforsch. 10a, 502, 1955.
33. F. Kuhrt, Siemens Zeitschr. 28, 370, 1954.
34. W. Hartel, Siemens Zeitschr. 28, 376, 1954.
35. H. Weiss, Siemens Zeitschr. 39, 433, 1965.
36. D. Effer, J. Electrochem. Soc. 112, 1020, 1965.
37. J. J. Tietjen és J. A. Amick, J. Electrochem. Soc. 113, 725, 1966.
38. J. P. Gunn, Solid St. Commun. 1, 88, 1963.
39. J. B. Gunn, IEEE Trans. Electron. Dev. ED—23, 705, 1976.
40. W. van Roosbroeck és W. Shockley, Phys. Rev. 94, 1558, 1954.
41. R. Braunstein, Phys. Rev. 99, 1892, 1955.
42. R. J. Keyes és T. M. Quist, Proc. IRE 50, 1822 1962.
43. И. Г. Басов, О. Н. Крохин и. Ю. М. Понов, ЖЕТФ 13, 1320, 1961.
44. R. N. Hall, G. E. Feuner, J. D. Kingsley, T. J. Soltyś és R. O. Carlson, Phys. Rev. Lett. 9, 366, 1962.
45. M. I. Nathan, W. P. Dumke, G. Burrus, F. H. Dill és G. J. Lasker, Appl. Phys. Lett. 1, 62, 1962.
46. T. M. Quist, R. H. Rediker, R. J. Keyes, W. E. Krag, B. Lax, A. L. McWhorter és H. J. Zeiger, Appl. Phys. Lett. 1, 91, 1962.
47. A. Onton, Festkörperprobleme Vol. 13 Ed. H. J. Queisser, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1973.
48. J. L. Shay és J. H. Wernick, Ternary chalkopyrite semiconductors, Pergamon Press, N. Y. 1974.
49. J. L. Shay, K. J. Bachmann, E. Buchler és J. H. Wernick, Appl. Phys. Lett. 23, 226, 1973.
50. J. L. Shay, E. Buchler és J. H. Wernick, Phys. Rev. 32, 4104, 1970.
51. S. W. Wagner, J. L. Shay, B. Tell és H. M. Kasper, Appl. Phys. Lett. 22, 351, 1974.
52. Electronics, Febr. 24. 1982 p. 112.

KÖNYVISMERTETÉS

P. W. Hawkes editor: Magnetic Electron Lenses
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg, 1982.
Topics in Current Physik. 462 oldal

A forgásszimmetrikus mágneses terek fókuszáló tulajdonságát H. Busch 1926-ban fedezte fel. Az első mágneses elektronlencsét az 1930-as évek közepén elektronmikroszkópban alkalmazták. Jelenleg e lencsék optikai teljesítőképessége megközelíti az elméletileg lehetséges határt. Ezért, valamint viszonylagos egyszerűségük és megbízhatóságuk miatt az elektronoptikai készülékek képalkotó részében szinte teljesen kiszorították az elektrosztatikus lencsákat. A könyv az első olyan összefoglaló jellegű munka, amely csak a mágneses lencsék elméletével és gyakorlatával foglalkozik.

Az első fejezetben P. W. Hawkes a forgásszimmetrikus mágneses terek paraaxiális tulajdonságait leíró differenciálegyenletet és az egyenlet perturbációjával levezethető aberrációkat tárgyalja. E. Kasper a második fejezetben a forgásszimmetrikus téreloszlású valódi lencsékben a mágneses tér meghatározásának numerikus módszereit, ezek alkalmazhatóságát ismerteti. Kitér a nem forgásszimmetrikus terekre, a lencsehibák számítására és az optimalizációs problémákra is. F. Lenz a harmadik fejezetben az erős és gyenge mágneses lencsékben az analitikusan leírható optikai jellemzőket tárgyalja. A negyedik fejezetben (W. D. Riecke) a lencsék tervezésének fizikai alapjait, mérnöki szempontjait találjuk. Egy-egy rész szól az objektív, a projektor és a kondenzor lencsék méretezéséről. Tárgyalja a lencsék optimalizálását, tekintettel a geometriai hibákra. Hasznos részeket találunk a lencsék pólussarui, a gerjesztő tekercsek, sztigmátorok, diafragmák méretezéséről, továbbá a zavaró mágneses terek és a mechanikai rezgések által okozott hibák kiküszöböléséről. A kisebb jelentőségű állandó mágnessel épített lencsék és a szupravezetési lencsék ugyancsak bő terjedelmet kaptak. Az ötödik fejezetet T. Mulvey írta a nem szokványos lencséről. Ezeknek — pl. a vasjárommentes, az egy pólusú lencséknek — közös jellemvonása az igen kis méret és az igen nagy áramerősségű gerjesztés és inkább csak a jövő eszközei lehetnek.

A könyv előnye, hogy benne az elméleti és a gyakorlati rész egyaránt nagy súllyal szerepel. Minden fejezethez bő irodalmi jegyzéket találunk. Az elméleti fejezetek között van bizonyos átfedés, de az ilyen szerkesztésű könyvekben ez aligha kerülhető el. A könyv elsősorban azoknak hasznos, akik mágneses lencsék építésével foglalkoznak.

Tremmel János

Resonances in Heavy Ion Reactions, Proceedings, Bad Honnef, Germany, 1981

A Springer Kiadó Lectures Notes in Physica sorozatának 156. kötete a Bad Honnef-ben 1981. október 12. és 15. között rendezett szimpózium anyaga.

Az elmúlt húsz évben a nehézion-reakciókban megfigyelt rezonanciajelenségek tanulmányozása, kezdve a $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ rendszerben megfigyelhető, egyedi esetnek tűnő sajátos rezonanciától a mag-mag kölcsönhatásokat teljesen általánosan jellemző rezonanciákig, szinte exponenciálisan megnőtt. Ez a mérés technika, adatkezelés és nem utolsósorban a nehézion-reakciók mechanizmusának megértése területén végbement óriási fejlődésnek köszönhető. Így a témakör legkiválóbb szakértőinek tanácskozása az aktuális kutatási témák eredményeinek és feladatainak szükségszerű összegezése volt.

A könyv anyaga a szimpózium főbb témáinak megfelelően az alábbi fejezetekre oszlik:

- I. Bevezető áttekintés
- II. Rezonanciák és fluktuációk
- III. Rezonanciák a C és O tartományban
- IV. Rezonanciák az sd héjban és a nehezebb tömegtartományban

- V. Rezonanciák a fúziós és teljes reakció-hatáskeresztmetszetekben
 VI. A rezonanciák direkt gamma bomlásainak vizsgálata
 VII. Spin polarizációs mérések
 VIII. Modellek és szisztematikák

A konferencia anyagának egyik központi témája a nukleáris kvázimolekulák kérdése, vagyis az olyan magállapotok vizsgálata, amelyek két mag ütközésekor keletkeznek és a külső nukleonok már mindkét mag erőterében mozognak az ütközési idővel közel azonos vagy annál nagyobb ideig. A megfigyelt virtuális-, kvázikötött magmolekulák vagy nagy élettartamú közbenső rendszerek a mag-mag kölcsönhatások tanulmányozásának igen érdekes területét jelentik, hisz a mag molekuláris rendszerek az erősebb kölcsönhatás és a sok nyitott és zárt csatorna következtében jóval bonyolultabb rendszerek, mint az atomi molekulák.

A korábbi elméletek kritikai áttekintése mellett a különböző modellek alapján végzett elméleti számítások legújabb eredményei mellett új kísérletileg megfigyelt jelenségek és a jövő kutatásait jelentő igen érdekes elképzelések széles skálájával foglalkozott a szimpózium. Érdekességként csupán az urán-urán magmolekula kérdését vagy a ^{56}Ni környékén 70 MeV-es terjesztések körül megfigyelt éles rezonancia kiválását a környező százezer hasonló spinű és paritású állapotok sokaságából, emelnénk ki.

A könyvet minden érdeklődőnek igen melegen ajánlhatjuk.

Kluge Gyula

Ja. B. Zeldovics: A vákuum elmélete lehet, hogy megoldja a kozmológiai talányt
Uszpehi fiziceszkizh nauk, 133, 479—503, 1981, vip. 3

1. Bevezetés
2. A határozatlanság elve és a nullponti rezgések
3. A saját függvényekről
4. A vákuum energiasűrűsége
5. Üres görbült tér
6. Energiadominancia és szingularitás
7. Kozmológia és vákuumpolarizáció.
 Szingularitás nélküli megoldás.

A cikk bevezetésében írja a szerző: „A kvantum-elmélet és az általános relativitáselmélet találkozására olyan kutatási terület, mely nehéz, de egyben rendkívül vonzó, érdekes és elvi szempontból nagyjelentőségű. Ennek a területnek néhány problémáját szeretném megvilágítani ebben a cikkben, legalábbis kvalitatíve, egyszerű formulák minimális használatával. Szeretném egyben felhívni az olvasó figyelmét arra, hogy a cikk nehézségi foka szükségszerűen egyenlőtlen”. Az utolsó idézett mondat arra utal, hogy a cikk első fejezetei bevezető jellegűek, könnyebben érthetőek, míg pl. az utolsó fejezet nehéz és még nem kiforrott problémákat taglal.

A bevezető jellegű részekre jellemző a fizikatörténeti utalások, analógiák használata a fogalmak és összefüggések megvilágítására. Már az első részben felhívja a figyelmet arra, hogy a vákuummal kapcsolatos fogalmaikhoz a kvantumelméletet kell alkalmazni. A vákuumot úgy kell definiálnunk, mint részecskék nélküli teret. Ez a meghatározás egybeesik azzal, amit abból a feltételből kapunk, hogy az adott térrészben az energiasűrűség minimális legyen. Nem biztos, hogy ez a minimum éppen nulla. Ennek illusztrálására párhuzamot von a 2. fejezetben a klasszikus oszcillátor és a kvantummechanikai oszcillátor között, rámutatva az utóbbinál a nullponti rezgések léteire, és felhívja a figyelmet, hogy analóg módon könnyű elképzelni, hogy a kvantumelmélet alkalmazása az elektromágneses térre hasonló eredményre vezet: az elektromos és mágneses tér nem lehet egyszerre nulla, az elektromágneses energiasűrűség nem lehet egyenlő nullával.

Hasonlóan idézi fel az olvasó számára a szerző pl. a Dirac-elméletet, majd pedig az általános relativitáselméleti összefüggéseket, központba állítva a vákuum energiasűrűségének problémáját.

Végül alkalmazva az addig elmondottakat, a szerző az utolsó részben az általános relativitáselmélet egyenleteinek egy megoldását tárgyalja. A szóban forgó megoldás még 1917-ből de Sittertől ered. Felelevenítése és a vákuum energiájával kapcsolatos megfontolások alapján alkalmazása a Világegyetem kezdetének leírására Gurovics és Sztarobinszkij (1979 és 1980) érdeme. Idézzük a szerzőt: „Amíg a de Sitteri megoldással és a vákuumpolarizációval kapcsolatos elképzelések meg nem jelentek, kizáró kérdések voltak napirenden. Mit is jelent a kezdet? Mi volt azelőtt, hogy 20 milliárd

éve megkezdődött a tágulás. Most már van valamiféle megoldásunk, amelyben nincs éles kezdet, amely $t \rightarrow -\infty$ -ig terjed."

Végezetül a megoldással kapcsolatos nyitott kérdéseket sorolja fel a szerző. A Világegyetem legutóbbi, legjobban ismert szakaszával kapcsolatban Marx és Szalay magyar tudósok nevét említi, akik elsőként kezdték tanulmányozni annak hatását a Világegyetem fejlődésére és szerkezetére, amit a neutrino nem-nulla nyugalmi tömege jelent.

Máthé Zoltán

**R. C. Whitten (editor): The Stratospheric Aerosol Layer,
Topics in Current Physics Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg—New York, 1981**

Már az 1920-as években, az égbolt szürkületkor megfigyelhető vörösödésének vizsgálatából Gruner és Kleiner arra következtetett, hogy a Föld légkörében szilárd és cseppfolyós halmazállapotú részecskék vannak. A sztratoszférában elhelyezkedő aeroszolréteget kísérletileg azonban csak közel negyedszázada mutatták ki Junge és munkatársai, a nagy magasságban jelen levő radioaktivitás mérésekor. Radarok, valamint repülőgépeken, ballonokon és újabban mesterséges holdakon elhelyezett műszerek segítségével hatalmas lépések történtek az aeroszol fizikai tulajdonságainak és morfológiájának a meghatározásában.

Az aeroszol több szempontból is figyelmet érdemel. Egyrészt az ún. „nagy” és „óriás” részecskék kondenzációs magokként a cseppképződés előfeltételeit teremtik meg, s ezzel jelentős szerepet játszanak a csapadék keletkezésében. Másrészt az aeroszolzrészecskék szórják és abszorbeálják a Napból érkező és a Föld által kibocsátott sugárzást. Mivel a Föld klímáját az atmoszférába beérkező napsugárzás és a világűrbe visszasugárzott földi, termikus infravörös sugárzás közötti energiaegyensúly határozza meg, a sztratoszferikus aeroszolzrészecskék, a szóró és abszorbeáló hatásuk miatt megzavarják ezt az egyensúlyt és ezáltal módosíthatják a klímát. A jelenlegi kutatások alapján úgy tűnik, hogy az intenzív vulkáni aktivitás — mely során nagy mennyiségű aeroszol jut a sztratoszférába — periódusai közben a Föld átlagos felszíni hőmérséklete csökken.

A könyv a sztratoszferikus aeroszolréteg fizikájának és kémiájának egy alapvető összefoglalását adja meg. A könyv öt, egymáshoz tartalmilag szorosan kapcsolódó fejezetből áll. A bevezető fejezet (szerzői: R. C. Whitten—P. Hamill) egy rövid áttekintést ad az aeroszol történetéről, mérési módszereiről, valamint az aeroszolréteg és a vele kapcsolatos mikrofizikai folyamatok jelenlegi ismereteiről.

A második fejezet (szerzői: E. C. I. Inn—P. B. Russel—M. P. McCormick—W. P. Chu) az aeroszol mérési technikájával és az abból levonható eredményekről ad egy alapos összefoglalást.

A harmadik fejezet (szerzői: R. G. Keese—A. W. Castleman, Jr.) az aeroszol keletkezésének és fejlődésének kémiai feltételeiről ad tájékoztatást. E témát három fő szempont alapján vizsgálja, melyek: (1) az aeroszol kémiai eredete, (2) a cseppképződési mechanizmusok, (3) az aeroszol „élete” során fellépő különböző kémiai reakciók.

A negyedik fejezet (szerzője R. P. Turco) a sztratoszferikus aeroszol modellek felépítésével és gyakorlati alkalmazásával foglalkozik. E fejezetben külön tárgyalásra kerül, hogy az antropogén hatások miképpen módosítják az aeroszol eloszlását és mennyiségét.

Az ötödik fejezet (szerzői: O. B. Toon és J. B. Pollack) a sztratoszferikus aeroszol és a klíma kapcsolatával foglalkozik, összefoglalja azokat a bizonyítékokat, melyek szerint a vulkáni kitöréseket anomális időjárás követheti. Diszkutálja a vulkáni részecskék sugárzási tulajdonságait és a földi légkör sugárzásháztartására gyakorolt hatását, valamint foglalkozik a sztratoszferikus aeroszol antropogén módosulásának és a klíma kapcsolatának modelljeivel.

A könyvet számos ábra, táblázat, valamint az egyes fejezetek végén található nagyszámú irodalmi hivatkozás teszi még színvonalasabbá. Tanulmányozása hasznos tájékoztatást nyújt mindazon kutatók számára, akik érdekeltek a sztratoszferikus aeroszol, valamint a földi klíma vizsgálatában.

Pap Judit

**James Glimm, Arthur Jaffe: Quantum Physics
A Functional Integral Point of View
Springer-Verlag, Berlin—New York—Heidelberg, 1981**

A könyv témája a modern fizika: statisztikus fizika, kvantummechanika és a kvantumtérelmélet. A könyv három részre tagolódik.

Az első rész bevezető a modern fizikába. Mindenekelőtt azokhoz a matematikusokhoz szól, kiknek a statisztikus fizika, a kvantumelmélet és a kvantumtérelmélet fogalmai ismeretlenek. A fizi-

kusoknak viszont a szerzők bemutatják a kvantummechanika fejlődését a Feynman—Kac formulán keresztül, továbbá megismerkedhetnek a funkcionálanalízis módszereivel ezen a területen. Az, ki ismeri a kvantumelméletet és a statisztikus mechanikát, a könyv olvasását kezdheti az első rész 6. fejezetével, melynek tárgya a térelmélet, és annak axiomatikus felépítése. (Euklidesz, Osterwalder és Schrader, Minkowsky axiómái). Az euklideszi térben definiált kvantumtérelmélet alkalmasan definiálva kapcsolatba hozható a Minkowsky térbeli elmélettel. Erre a fejezetre épül a második rész is.

A második rész a kvantumterek elméletét tartalmazza. Ez a rész tárgyalja az utóbbi évtizedek eredményeit, melyek elérésében nagy szerepe volt a konstruktív térelmélettel foglalkozó fizikusoknak. Így Frölich, Guerra, Nelson, Osterwalder, Rosen, Schrader, Simon, Spencer, Symanzik elméleti fizikusoknak, és nem utolsósorban a könyv szerzőinek, J. Glimm-nek és A. Jaffe-nak. A Feynman—Wiener funkcionális integrálok alkalmazása Glimm, Jaffe és Nelson által az 50-es évek végén kezdeményezett konstruktív program keretén belül jelentette a konstruktív térelmélet kiszélesedését. A második rész egy tudományos vita megoldása. Évek óta foglalkoztatta a fizikusokat és a matematikusokat a kérdés, vajon a nemlineáris térelmélet összeegyeztethető-e a relativisztikus kvantummechanikával. Matematikailag teljes leírását találjuk ebben a részben a $P(\phi)_{d=2}$ tereknek, továbbá ismertetve vannak a Yukawa $_{d=2,3}$, $\phi^4_{d=3}$, Higgs $_2$ stb. terek. Foglalkoznak a renormálás problémáival is. A szerzők által tárgyalt függvények tere fölött vett funkcionális integrálás ma alapvető matematikai módszer, melynek segítségével felépíthető a kvantummechanika (Feynman pályaintegrál módszere), de a kvantumtérelmélet és a statisztikus fizika is.

Részecskék kölcsönhatása, ütközésmélet, fázisátmenetek a tárgya a harmadik résznek. Ezenkívül ez a rész az előzőekben tárgyaltak továbbfejlesztése.

A könyv csak mélyebb matematikai ismeretekkel rendelkező, és a speciális téma iránt érdeklődő matematikusok, fizikusok és matematikai fizikával foglalkozó szakemberek számára ajánlható. A könyvet bőséges irodalomjegyzék zárja.

Vörös Zoltán

Peter Brüesch: Theory and Experiments I.
Springer Series in Solid-State Sciences Vol. 34, Ed. by P. Fulde,
Springer, Berlin—Heidelberg—New York 1982, 261 oldal

A könyv alcíme „Lattice Dynamics and Models of Interatomic Forces”. A szerző elméleti érdeklődéssel rendelkező kísérleti fizikus, aki az Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanneon végzős hallgatók számára 1975 és 1980 között tartott előadását dolgozta át könyv formába. Céljaul tűzte ki nemcsak az alapfogalmak következetes bevezetését és megismertetését, hanem azt is, hogy a kísérletek értelmezésére gyakorlati kiindulópontokat adjon. A könyv alapfokú kvantummechanikai és kísérleti szilárdtest-fizikai előismereteket feltételez.

A jelen első kötetben az elméleti alapok kiépítése történik meg, a kísérleti technikák ismertetése, a kísérleti eredmények értelmezése és egy sor, a fononokkal közvetlenül kapcsolatos jelenség tárgyalása (pl. infravörös, Raman- és Brillouin-spektroszkópia, röntgensugárzás kölcsönhatása fononokkal, rugalmatlan neutronszórás és kevésbé részletesen piezo- és ferroelektromosság, olvadás, hővezetés stb.) a későbbiekben megjelenő második kötetre marad.

Az első kötet 5 fejezetből, a hosszabb levezetéseket tartalmazó függelékkel, 222 pontból álló irodalomjegyzékből és részletes tárgyszókatalógusból áll. Az első fejezet a témakör történeti kialakulását és az alapközelítéseket (harmonikus és adiabatikus) tárgyalja. A második fejezet a kétatomos lineáris lánc klasszikus és kvantummechanikai modelljét mutatja be és eljut a fononok fogalmához, valamint a Debye modellhez. A harmadik fejezetben a szerző háromdimenziós rácsokra általánosítja az alapfogalmakat és tárgyalja a rácsdinamika és a rugalmasságtan kapcsolatát. Az erőkonstansok, a dinamikus mátrix és a diszperziós relációk fogalmát az egyféle atomból álló lapcentrált kristályok példáján illusztrálja. A negyedik fejezet az előzőektől némileg eltérően már nem tisztán deduktív jellegű, amennyiben itt már a fonon-diszperziós görbék értelmezéséről, az atomok közötti kölcsönhatások különböző modelljeiről van szó. E modellek kapcsán tárgyalja a kondenzált nemes gázok, az ionos, kovális és molekuláris kristályok és vázlatosan a fémek fononstruktúráját. Végül az ötödik fejezet az anharmonicitással foglalkozik a kétatomos molekulából kiindulva. A kváziharmonikus közelítést háromdimenziós kristályra is alkalmazva a szerző felírja az állapotegyenletet és értelmezi a hőtágulást. A self-konzisztens harmonikus közelítést vezeti be az erősen anharmonikus jelenségek vizsgálatára. A kötet a fonon—fonon kölcsönhatás, a rezonanzfüggvények és a frekvenciaeltolódások, ill. vonalkiszélesedések tárgyalásával zárul.

A jelen első kötet külön előnye, hogy minden fejezet végén feladatok találhatók, melyek a tárgyalt anyag kiszélesítését és elmélyítését teszik lehetővé.

A könyv bevallottan nem lép túl az adiabatikus közelítésen, és így nem foglalkozik pl. az elektron—fonon szórással vagy a szupravezetéssel. Egységes szemléleténél, világos és tömör stílusánál és — figyelembe véve a remélhetőleg hamarosan megjelenő második kötetet is — a szorosan vett fonon-témakört kimerítő voltánál fogva P. Brüesch könyve feltétlenül ajánlható a szilárdtest-fizikával foglalkozó egyetemi hallgatóknak és szakembereknek.

(C. G.)

**Dynamics of Nuclear Fission and Related Collective Phenomena,
Proceedings, Bad Honnef, Germany, 1981**

A Springer Kiadó Lecture Notes in Physics sorozatának 158. köteteként jelent meg az NSZK-beli Bad Honnef-ben 1981. október 26—29. között rendezett nemzetközi szimpózium anyaga.

A könnyű és nehéz ionokkal előidézett, hasadáshoz vagy fúzióra vezető magreakciók fizikájának gyors fejlődése ismét aktuálissá tette egy, a nehéz magokban lejátszódó kollektív jelenségekkel foglalkozó nemzetközi szimpózium összehívását. A könyv ennek anyagát adja közre és a különböző témaköröknek megfelelően a következő fejezetekre oszlik:

- I. Maghasadás.
- II. Energiadisszipáció alacsonyenergiás hasadási reakciókban.
- III. Koherens magállapotok és bomlási tulajdonságaik.
- IV. Fúzióhoz és hasadásra vezető nehézion-reakciók és az impulzusátadási mechanizmus.
- V. A magok pionkeltéssel járó hideg fúziója.

A szimpózium fő témaköre a maghasadás volt. A termikus neutronokkal kiváltott hasadási, illetve nehézion-reakcióban megfigyelt, viszonylag igen alacsony gerjesztési energiákkal járó ún. hideg nukleon átrendeződés, a hég és páros-páratlan effektusok fontos szerepe, valamint a nagy impulzusmomentumú reakciókban megfigyelt, igen gyors hasadásszerű folyamatok vizsgálata igen érdekes eredményekre vezetett. A műonokkal indukált hasadás a nehézmagok hasadási gátszerkezetére, a nagyfelbontású egyéb hasadási mérések pedig a hasadási izomerek vibrációs gerjesztésére, valamint a hasadási hatáskeresztmetszetek rezonanciáinak finomszerkezetére adtak értékes információkat. Más reakciómechanizmus vizsgálatok a hasadási gát környékére vonatkozó szelektív impulzusmomentum lehetőségére mutatnak.

Új kísérleti és elméleti eredmények születtek a nehézion- és hasadási reakciókban fellépő energia és impulzusmomentum disszipáció mechanizmusával kapcsolatban is.

Igen széles körű érdeklődésre tarthat számot a Grenoble-i „Cosi fan tutte” project jelenlegi állapotáról szóló beszámoló.

Különböző hasadó magokon végzett mérésekben a maghasadás jelenségét mint koherens vibrációs jelét használták az óriásrezonanciák gerjesztésének és bomlásának tanulmányozására.

A nehézion-reakciókkal kapcsolatban is több új kísérletről, jelentős elméleti fejleményekről és új modellekről számoltak be. Így elsősorban a nehézion-reakciók dinamikus és statisztikus tulajdonságai, az energia-, spin- és izospin-fluktuációk szerepe a hasadási és mélyen inelasztikus reakciókban került az érdeklődés előterébe.

Az impulzusátadás vizsgálata nehézion- vagy egyéb nagy energiájú magreakciókban, valamint a nehéz nukleonrendszerek fúziója, hasadása vagy break-up-ja során a maganyag kompresszibilitására adott értékes adatokat, információkat.

Új kísérleti és elméleti eredményeket ismerhetünk meg a közepes energiákon végzett, pionkeltéssel járó nehézionfúziós kísérletekkel kapcsolatban, közöttük a „hideg fúzió” lehetőségét.

A szimpóziumon áttekintő összefoglalóként hangzott el előadás az „anyag elemi építőköveiről” alkotott jelenlegi ismereteinkről és az ezen a szinten is megfigyelhető kollektív jelenségekről.

Kluge Gyula

**Pradip Niyogi: Integral Equation Method in Transonic Flow
Lecture Notes in Physics, 157
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982. 189 oldal**

A szerző a könyv előszavában tudtára adja az olvasónak, hogy a kötet tartalma a szerzőnek a Summer Institute at the Department of Applied Mathematics-ban (Bangalore, 1977), a Transonic Workshop at the National Aeronautical Laboratoryban (Bangalore, 1979), az Indian Society for Theoretical and Applied Mechanics kongresszusán (Rourkels, 1979) és a First Asian Congress of Fluid Mechanics alkalmával (Bangalore, 1980) tartott előadásai nyomán alakult ki.

A recenzens nem titkolja: irigyl a könyv szerzőjének a hallgatóit. A könyv tartalma annyira egységes és áttekinthető, a tárgyalásmód annyira kristálytisztán logikus, matematikailag — a legjobb értelemben — „elegáns”, ami csak a legjobb előadókat és a legjobb szakkönyvrőkeket jellemzi.

A transzszonikus áramlások leírására alkalmazott matematikai módszerek három csoportra oszthatók: a hodográf-módszer, az integrálegyenletek módszere és a numerikus módszerek. (Mellesleg megjegyezve: transzszonikusnak nevezzük az áramlást, ha az áramlási térben szuperszonikus sebességek és szubszonikus sebességek egyaránt előfordulnak. Kár, hogy nincs rá alkalmas magyar szakkifejezés.) A szerző nem titkolja: elfogultan kedveli (és előnyben részesíti) az integrálegyenletek módszerét. „Elfogultságát” indokolja: e módszer alkalmazása (a matematikai „elegancián” túl) lehetőséget ad arra, hogy az egyes (általános és konkrét) áramlástan feladatok megoldásának egzisztenciáját és egyértelműségét megvizsgáljuk, hogy általános megoldásokat (viszonylag egyszerűen) speciális esetekre alkalmazzuk, illetve hogy speciális esetekre nyert eredményeket általánosítsunk.

A szerző nagy tisztelettel adózik K. Oswatitschnak, aki (vékony, szimmetrikus profil mentén kialakuló transzszonikus áramlásra) elsőként fogalmazta meg a transzszonikus áramlás integrálegyenletét, s ez a dolgozata úttörő jelentőségűnek bizonyult.

A szerző a könyv első fejezetében megmutatja, hogyan írható át (hogyan célszerű átírni) az áramlástan (megszokott) differenciálegyenleteit integro-differenciálegyenletek, majd integrálegyenletek alakjára, és taglalja az egyes esetekre nyert integrálegyenletek fizikai tartalmát, illetve matematikai struktúráját.

A további fejezetek címe felvilágosítást ad tartalmukról is:

2. Megoldási módszerek: a kutatás korábbi szakasza. 3. Szimmetrikus profilok mentén kialakuló áramlás leírása, ha a sebesség a végtelenben eltűnik. 4. Aszimmetrikus profilok véges „beesési” sebesség esetén. 5. Áramlás vékony szárnyprofilok mentén. 6. Szuperkritikus szárnyprofil-fajták. 7. A transzszonikus áramlástan feladatok megoldásának az egzisztenciája és egyértelműsége.

A függelékben olyan lineáris, szinguláris integrálegyenlet megoldásával foglalkozik a szerző, amelyben a szingularitást az integrálmag dipóljellege okozza; majd a függelék ugyanennek a feladatnak háromdimenziós változatával zárul.

A kiváló könyvet a recenzens melegen ajánlja mindazoknak a fizikusoknak és mérnököknek, akik áramlástan (turbinákkal, repülőgépek tervezésével és szerkesztésével, általában transzszonikus áramlásokkal) és mindazoknak a matematikusoknak, akik integrálegyenletekkel foglalkoznak.

Szabó János

**F. H. Schroeder (ed.): Stability in the Mechanics of Continua
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982. 412 oldal**

A kötet az International Union of Theoretical and Applied Mechanics (IUTAM) által 1981. augusztus 31. és szeptember 4. között Nümbrechtben szervezett konferencia előadásait adja közre. Az első, ilyen témájú konferenciát a IUTAM 1969-ben tartotta; a közben eltelt tizenkét év alatt a kontinuummechanikai stabilitások, illetve instabilitások területén számos új, lényeges eredmény született, s ezért a IUTAM vezetősége — teljes joggal — időszzerűnek tartotta, hogy az elért eredményeket (és a még megoldatlan problémákat) nemzetközi konferencián ismertessék, illetve vitassák meg.

A könyv az előadások szövegét — két témakörre bontva — az előadások sorrendjében tartalmazza. A két témakör: szilárd kontinuumok stabilitása és az alkalmazott matematikai módszerek; folyékony kontinuumok stabilitása.

Mindkét témakörben számos, érdekes, de minden esetben speciális kontinuummechanikai stabilitás részletes vagy kevésbé részletes (az esetek többségében elméleti) vizsgálata olvasható a kötetben.

Íme, néhány önkényesen kiragadott előadascím: Rugalmas—rugalmatlan kontinuumok stabilitása (De Boer, D. Meyer); Kereszteffektus és rugalmas rúd és a viszkoelasztikus féltér határfelületén visszaverődő hullámokban (N. Nakagawa, R. Kawai, O. Mahrenholtz); Axialis terhelésű, imperfekt, hengeres héjak stabilitása (G. J. Simitses, I. Sheinman); Energia-konzisztens lineáris és nem-lineáris stabilitási egyenletek hiperelasztikus héjakra (Y. Basar, W. B. Krätzig); Instabilitási feladatok megoldásának az egzisztenciája a lineáris rugalmasságtanban (R. J. Knops).

A folyékony kontinuumok stabilitása témakörből: Redukált molekuláris káosz és az áramlások stabilitása (J. A. Johnson II., Lin I., E. Ramaiah); Forgó mozgást végző folyadékok stabilitásáról (K. S. Eckhoff).

Mindegyik tárgyalt probléma érdekes; különösen tanulságos a hasonló stabilitási problémák különböző matematikai tárgyalásmódjának az összevetése. A recenzius azonban (valószínűleg a konferencia résztvevőinek az utólagos egyetértésével) hiányolja mind a szilárd, mind a folyékony kontinuumok stabilitására vonatkozó, átfogó, általános (összefoglaló és kitekintést nyújtó) előadás szövegét. Egy ilyen összefoglaló áttekintés a kötet értékét (különösen a témával ismerkedő vagy ismerkedni kívánó, fiatal kutatók számára) lényegesen növelte volna. Ennek hiányában a könyv elsősorban a téma specialistáinak ajánlható.

Szabó János

David L. Book (ed.): Finite-Difference Techniques for Vectorized Fluid Dynamics
Springer Series in Computational Physics
Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin, 1981. 226 oldal

A szerzők a könyvben az U. S. A. Hajózási Kutató Laboratóriumában (Naval Research Laboratory) az áramlástan alapegyenleteinek a megoldására az utóbbi években kidolgozott számítástechnikai (gépi numerikus) módszereket ismertetik. (A módszerek — mutatis mutandis — más, hasonló típusú egyenletekkel leírható fizikai problémák megoldására is alkalmazhatók).

A könyv az alapegyenletek rövid áttekintése és a továbbiak szempontjából fontos matematikai sajátosságok taglalása után vázolja az alkalmazott számítástechnikai módszerek elméleti alapjait és a gépi (Fortran) programozás lépéseit. Az ismertetett módszerek: kvázirészecske-módszer, a karakterisztikák módszere, a Lagrange-féle differenciámódszer, az Euler-féle differenciámódszer, a véges elemek módszere, a spektrális felbontáson alapuló módszer. A szerzők nem feledkeznek meg arról, hogy összevessék a különböző módszerek előnyeit és hátrányait; ha röviden is, de szót ejtenek a konvergencia vizsgálatának, a hibabecslésnek a lehetőségeiről, és külön (bár szintén rövid) fejezet foglalkozik a (hidrodinamikai) kauzalitás elvével. A negyvennégy oldalnyi függelék konkrét feladatok Fortran-programját tartalmazza; a hatoldalnyi irodalom a további elmélyülést, illetve a témában kevésbé járatosoknak a „bevezetést” szolgálja.

A könyv elsősorban olyan — áramlástanak, meteorológiával, oceanográfiával, aviációval foglalkozó — specialistáknak ajánlható, akik az áramlástan alapegyenleteit, azok alapvető megoldási módszereit és a számítástechnikai programozási nyelvek valamelyikét már ismerik.

Szabó János

Demetri P. Telionis: Unsteady Viscous Flows
Springer Series in Computational Physics
Springer-Verlag, Berlin—New York—Heidelberg, 1981. 408 oldal

Az instacionárius áramlásokkal, az áramlások „átmeneti” szakaszával, a turbulenciával foglalkozó könyvek (és dolgozatok) száma az utóbbi években ugrásszerűen megnövekedett, ami a téma — tágabb értelemben a bifurcatioelmélet és a káosz-elmélet — iránti elméleti és gyakorlati érdeklődés szinte robbanásszerű megnövekedését jelzi. (A végtelen sok szabadsági fokú) folyékony rendszerek és a (véges szabadsági fokú) dinamikai rendszerek között a hidat, az összekötő kapcsolatot a „centre-manifold”-elmélet képezi, ami érthetővé teszi a megnövekedett érdeklődést a folyadékáramlás „átmeneti” szakaszában gerjesztődő, kisszámú hullámmódusok kölcsönhatásai, csatolásai iránt.

A hidrodinamikusok évtizedeken át megelégedtek („kénytelenek” voltak megelégedni) a folyadékáramlások (és a turbulencia) fenomenologikus leírásával. Ki nem mondott „hiányérzetük” igazolódott, amikor — nem kis mértékben a matematikai káoszelmélet eredményeként — nyilvánvalóvá vált, hogy a sűrűlő folyadékok áramlástan alapegyenleteinek a megoldása (legalábbis a kezdeti feltételek egy adott tartományán belül) igen érzékenyen „reagál” a kezdeti feltételek kicsiny változásaira: a trajektóriák, amelyek a fázistérben bizonyos ideig „közel estek” egymáshoz, hosszabb idő után lényeges különbséget mutathatnak. (Ezt az átmeneti állapotot nevezhetjük a turbulencia „előcsarnokának”).

Az instacionárius áramlásokat két főcsoportra szokták felosztani: külső perturbációk okozta instacionárius áramlásokra és a kezdeti feltételek változása miatt fellépő (belső) instacionaritásra. A szerző — az egyébként kiváló — könyvében szinte kizárólag az instacionárius áramlások belső csoportjával foglalkozik: hogyan „felel” a folyadékáramlás a tranziens vagy periódikus külső zavarokra.

Íme a könyv fejezetei: 1. Alapfogalmak. 2. Numerikus analízis. 3. Impulzív mozgás. 4. Zérus átlagú oszcillációk. 5. Nem zérus átlagú oszcilláló áramlások. 6. Instabilis turbulens áramlások. 7. Instabilis szeparáció.

A szerző a könyv előszavában a következőket írja: „...Értékes tapasztalatokra tettem szert azon a téren, hogyan lehet a téma különböző aspektusait felsőbb éves egyetemi hallgatóknak előadni, megvilágítani. Előtanulmányaik különbözősége segített megértenem hallgatóságom potenciális nehézségeit. A könyv tehát olyan fizikusok és mérnökök részére készült, akik a témában kezdők ugyan, de van némi ismeretük a klasszikus áramlástanban és a határréteg-elméletben. A könyv írása közben az áramlástan iránt érdeklődő, kutató intézetben vagy az iparban dolgozó, fiatal szakemberekre gondoltam. Az alapkoncepciót és az alapproblémák elméleti alapjait az ő igényeikhez igazodva igyekeztem részletesen kifejteni. Alkalmazásokra is találunk példákat a könyvben, de a részletek iránt érdeklődők a fejezetek végén található irodalomra vannak utalva.”

Egy-egy téma tárgyalásmódja a numerikus, számítógépi módszer alkalmazását (is) előkészíti. Konkrét gépi programok segítik a számítástechnika áramlástani alkalmazásának az elsajátítását.

A recenzens véleménye szerint a szerző a könyv előszavában túlságosan szerényen fogalmaz. A könyv nemcsak az áramlástan iránt érdeklődő, „kezdő” fizikusoknak és mérnököknek ajánlható; haszonnal forgathatják (és új ismereteket, módszereket találhatnak benne) „haladó” hidrodinamikuskok, fizikusok, mérnökök is.

Szabó János

**Robert G. Hunsperger: Integrated Optics: Theory and Technology Optical Series 33
Springer-Verlag, Berlin, 1982**

A könyv olyan mérnököknek, kutatóknak és egyetemi hallgatóknak ajánlható, akik az integrált optika alapelvei, technológiája és alkalmazásai iránt érdeklődnek. A kb. 15 éves múlttra visszatekintő integrált optika az opto-elektronikai rendszerek új generációjával foglalkozik, ahol az elektromos vezetékek, kábelek helyett fényvezető szálakat alkalmaznak és a hagyományos integrált áramköröket (IC) az ún. optikai integrált áramkörök (OIC) váltják fel. Ezekben az információt fényjelek hordozzák, s az egyes optikai elemeket (lézerek, detektorok, modulátorok, iránycsatlók, szűrők stb.) sík optikai hullámvezetők kötik össze. Előnyük a rendkívül nagy átviteli sávzélesség (10 GHz) mellett a rádiófrekvenciás zavarok iránti érzéketlenség is.

Az igen érdekes és könnyen érthető könyv egy egyféléves egyetemi előadássorozat anyagát foglalja össze 16 fejezetben. Módszerére jellemző, hogy nemcsak az alapjelenségek és ezek elméleti hátterét mutatja be, hanem az ezeken alapuló eszközkészítés technológiájával és a kész elemek, vagy elemrendszerek alkalmazási területével is megismerteti. Az első fejezetben a szerző az integrált optika céljait, előnyeit ismerteti, összehasonlítva a száloptikával és az elektromos integrált áramkörökkel.

A 2—5. fejezetben a sík optikai hullámvezetők elméletével és készítésük technológiájával ismerkedhetünk meg.

A 6—7. fejezet a fényenergiának a hullámvezetőbe történő be- és kicsatolási módszerével foglalkozik, míg a 8—9. fejezet a modulátorokkal, a 10—14. fejezet az integrált optikában használatos fényforrásokkal (félvezető lézerekkel), a 15. fejezet pedig a detektorokkal ismerteti meg az olvasót. Végül az utolsó fejezetben az integrált optika alapkérdésére kapunk választ: hol és mikor lehet majd a gyakorlatban is felhasználni ezeket az eszközöket.

(K. N.)

**A. Ambrózy: Electronic noise
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982**

Az elektronika hasznos jeleit zavaró jelenségek közé tartoznak az atmoszferikus, erősáramú, kozmikus eredetű zavarok, valamint az elektromos vezetés fizikai tulajdonságaira visszavezethető áram- és feszültségingadozások, az ún. elektronikus zajok. Ezek okai az elemi töltések nem egyenletes energiaeloszlásában, ill. a hőmozgásban keresendők. A könyv ezekkel az elméletileg sem ki-küszöbölhető zajjelenségekkel foglalkozik.

A zajok elméletével és gyakorlatával foglalkozó szakirodalom olyannyira bőséges és specializált, hogy a könyv angol nyelvű megjelenése reális hiányt pótol, amennyiben átfogó képet ad a zaj elméleti fizikai és matematikai vonatkozásairól. A mű egységes keretbe foglalja a legszükségesebb alapokat, megismerteti a matematikai, statisztikai és a valószínűségelméleti formulák tényleges

fizikai tartalmával. A fizikus, ill. a gyakorló mérnök kiváló segítséget kaphat a modellalkotás összetett munkájában.

A bevezetésben olyan alapfogalmakkal ismerkedhet meg az olvasó, mint az amplitúdó- és teljesítménysűrűség. Ezután a pillanatértékek eloszlás- és sűrűségfüggvényével találkozunk. Itt kerül sor a várható érték, a szórás, a karakterisztikus függvény fogalmának bevezetésére, a normális eloszlás levezetésére, a diszkrét és folytonos eloszlások ismertetésére. A következő fejezet a sztochasztikus jelek idő- és frekvenciartománybeli viselkedését taglalja, különböző típusú jelek esetén, a teljesítményspektrum ismeretében. Itt tárgyalja az autokorrelációs függvények és teljesítményspektrumuk összefüggéseit, ill. lineáris hálózat választás kijelű sztochasztikus gerjesztésre. A továbbiakban a különböző fizikai okokra visszavezethető zajtípusokat veszi sorra, úgy mint sörét, árameloszlási, termikus, átütési, generációs-rekombinációs, flicker és burst zajt. Később rátér a félvezetők pn-átmenetének vizsgálatára, majd különböző frekvenciartományokban elemzi a bipoláris és FET-tranzisztorok zajforrásait, ill. zajtényezőit, valamint kitér az integrált áramköri tranzisztor problémáira. Mivel a zaj méréséhez használt detektorok általában nemlineáris átviteli karakterisztikával rendelkeznek a következő fejezet a különböző típusú detektorok amplitúdó- és teljesítményspektrumának transzformációjával foglalkozik. Az elektronika aktív eszközeiben keletkező zaj nem mindig modellezhető az elmélet segítségével. Így az utolsó fejezetben a zaj és paramétereinek mérésének analóg és digitális módszereivel ismerkedhetünk meg.

Az egyes részek után tanulságos példákat találunk, amelyek szemléletes útmutatást adnak az elmélet gyakorlati alkalmazására. A fejezetenkénti bőséges irodalomjegyzék az egyes részletek iránt mélyebben érdeklődő olvasót is kielégíti.

Derka István

B. K. Vainshtein, V. M. Fridkin, V. L. Indenbom:
Modern Crystallography II, Structure of Crystals
 Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 21.
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982

A „Modern krisztallográfia” sorozatot a Szovjetunió Tudományos Akadémiája Krisztallográfiai Intézetének munkatársai írták. A sorozat négy kötetből áll. Az első kötet a kristályok szimmetriáját és a szerkezeti krisztallográfia módszereit tárgyalja. A most ismertetésre kerülő második kötet a kristályok szerkezetével foglalkozik. A harmadik kötet a kristályok növekedésével, a negyedik kötet a kristályok fizikai tulajdonságaival kapcsolatos ismereteket öleli fel. A sorozat először orosz nyelven jelent meg az 1979–81-es években. A sorozat angol nyelvű kiadását a Springer Kiadó gondozza. Tavaly jelent meg angolul az első kötet, mint a Springer Series in Solid-State Science 15. kötete, és alig három évvel az orosz nyelvű kiadás megjelenése után kezünkben tartjuk a „Modern krisztallográfia” második kötetének angol nyelvű kiadását is.

Ez a második kötet öt fejezetre oszlik. Az első fejezet az atomok szerkezetével, az atomok közti kémiai kötéssel, a kristályrács energiájával, az atom- és ion-rádiuszok problémájával, a kristályok atomszerkezetével, a szilárd oldatokkal és az izomorfizmussal foglalkozik. A második fejezetben a kristályos szerkezetek fő típusai kerülnek ismertetésre. A 147 oldalas fejezet nemcsak az egyszerűbb kristályszerkezeteket, hanem a polimerek, a folyadékkristályok és a biológiai kristályok szerkezetét is tárgyalja. Az első két fejezetet B. K. Vainshtein akadémikus írta.

A rövid, húszoldalas harmadik fejezet tárgya a kristályok sáv szerkezete. A rácsdinamika és a fázisátalakulások ismertetése található a negyedik fejezetben (43 oldal). Az egyes alfejezetcímek: atomok rezgése a kristályban, a kristályok hőkapacitása, hőkitágulása és hővezetése, polimorfizmus, atomrezgések és a polimorf átalakulások, rendezett típusú fázisátalakulások és az elektronon kölcsönhatás, Debye állapotegyenlete és a Grüneisen formula, a fázisátalakulások és kristályszimmetria kapcsolata. Ezen utolsó alfejezetet E. B. Loginov míg a negyedik fejezet többi részét, akárcsak a harmadik fejezetet V. M. Fridkin írta.

Az ötödik fejezet (V. L. Indenbom) hetvenöt oldala a reális kristályok hibaszerkezetével foglalkozik. A ponthibák, a diszlokációk, a rétegződési hibák, a mozaikszerkezet, az ikresedés és a rács hibák közvetlen megfigyelését lehetővé tevő módszerek kerülnek tárgyalásra az egyes alfejezetekben.

Tárgymutató, tizenöt oldalas irodalomjegyzék és 345 ábra emeli a kötet használhatóságát. Az angol nyelvű kiadásban kisebb javításokra, kiegészítésekre is sor került.

Ez a kötet is tükrözi a 4 kötetes sorozat szerzőinek azon célját, hogy alapvető ismereteket

szolgáltassanak a krisztallográfia összes fontos problémájáról és egymással való összefüggésükben mutassák be a krisztallográfia egyes ágait.

A könyv fizikusokon kívül melegen ajánlható vegyészeknek, mineralógusoknak és mindazoknak, akik anyagtudománnyal foglalkoznak.

Hartmann Ervin

I. A. Kunin: Elastic Media with Microstructure I, One-Dimensional Models
Springer Series of Solid-State Sciences 26
Springer-Verlag Heidelberg, 1982

A szerző célja az, hogy a rugalmas közegben terjedő hullámok általános elméletét adja meg. A jelenlegi, első kötet az egydimenziós modellekkel foglalkozik. Egy később megjelenendő kötet fogja tárgyalni a háromdimenziós esetet.

A címben szereplő mikrostruktúra szó arra utal, hogy olyan komplex struktúrájú láncokon terjedő hullámokról van szó, melyeknél az elemi cellán belül több atom is lehetséges és az atomok helyén további belső szabadsági fokkal rendelkező objektumok állhatnak, például elforgásra képes molekulák.

A szerző erősen matematikusi hozzáállással fogalmazza meg a problémát, de fizikusok számára érdekes újdonságot nem ad sem az egyszerű (egyatomos lánc), sem a komplex struktúrájú (kétatomos lánc) vizsgálatában.

A könyv érdekessége nem is ez, a könyv első felét kitevő rész, hanem a nemlineáris hullámokkal foglalkozó második rész. A Korteweg-de Vries egyenlet példáján keresztül bevezeti a szoliton gerjesztéseket és azok tulajdonságait is vizsgálja.

A könyv utolsó fejezete, mely az inverz szórási problémát mutatja be, mint a nem-lineáris hullámegyenletek megoldásának egy módját, V. E. Zaharov munkája. Ez a fejezet tette az egész könyvet ismertté, hiszen az eredeti, orosz nyelvű kiadás 1975-ös megjelenésekor még nem volt más összefoglaló mű ebben a témakörben. Ma már azonban sok könyv is foglalkozik az egzaktul megoldható nem-lineáris egyenletekkel és a szoliton típusú megoldásokkal, ezért a jelen kötetnek ez a vonzereje kevésbé érvényesül.

A könyv egyik nagy hátránya, hogy rendkívül szokatlan módon a kötetben szereplő hivatkozásoknak csak egy része van megadva, jelentős hivatkozások szerepelnek úgy, hogy azok listája csak a második kötetben lesz benne.

A kötet leginkább az elméleti mechanikával foglalkozók számára ajánlható.

Sólyom Jenő

T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen (editors): Real-Space Renormalization
Topics in Current Physics 30
Springer-Verlag, Berlin, 1982

A renormálási csoport módszernek a fázisátalakulások tanulmányozásában történő alkalmazása ma már klasszikus területnek számít a fizikában. Ugyanakkor még mindig szükség és lehetőség van újabb és újabb ötletekre az alkalmazásokban, hiszen, mint Wilson mondta: „A renormálási eljárásnak nincs szakácskönyve”.

Ez a kötet hét összefoglalót tartalmaz olyan renormálási csoportos eljárásokról, illetve alkalmazásokról, melyek mind kristályláncsón értelmezett, diszkrét modellekre alkalmazhatók. A két szerkesztő ad áttekintést az első cikkben az utóbbi években elért fejlődésről, majd az egyes cikkek részletesebben is foglalkoznak egyes kérdésekkel. T. W. Burkhardt a Migdal—Kadanoff eljárás néven ismert módszert ismerteti. R. H. Swendsen a Monte Carlo renormálásról ad összefoglalót. G. F. Mazenko és O. T. Valls a valós térbeli renormálási csoportnak dinamikai problémákra történő alkalmazását tárgyalja. P. Pfeuty, R. Jullien és K. A. Penson a kvantummechanikai rendszereken végrehajtott renormálási eljárást mutatja be. M. Schick a valós térbeli renormálásnak abszorbeált rendszerekre történő alkalmazásával foglalkozik. Végül H. E. Stanley, P. J. Reynolds, S. Redner és F. Family a lineáris polimerek, elágazásos polimerek és gélek tulajdonságait vizsgálják a módszerrel.

A nevekből is világos, hogy a területen jelenleg is aktívan dolgozó, neves kutatók írták az összefoglalókat, s azok felülélik az utóbbi időben végzett ilyen jellegű munkát. A kötet igen hasznos lehet mindazok számára, akik maguk is a renormálási csoport alkalmazásával foglalkoznak, vagy áttekintést kívánnak szerezni az utóbbi időben itt elért eredményekről.

Sólyom Jenő

G. Benedek, U. Valbusa (ed.-s): Dynamics of Gas-Surface Interaction
 Springer Series in Chemical Physics 21
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982

Korunkban a felületkutatás nagy fejlődésének lehetünk tanúi. Ez elsősorban a kísérleti technikák (LEED, XPS, UPS, AES stb.) rohamos fejlődésének számlájára írható. E módszereket kiterjedten alkalmazzák a szilárdtest-fizikában, elektronikában, metallurgiában, a heterogén katalízis vizsgálatánál és a biofizikában. A könyv e módszerek közül elsősorban az atom ill. molekulasugár-szórással kapcsolatos kérdésekkel foglalkozik, amely kis behatolási mélysége következtében kiválóan alkalmas a molekulafelület kölcsönhatási potenciál, és ezen keresztül szabad ill. adszorbeátumok által részlegesen vagy teljesen fedett felületek struktúrájának és morfológiájának tanulmányozására, vizsgálatára. A könyv tulajdonképpen az International School on Material Science and Technology 3. évfolyamában ugyanezen címmel az Ericei „Ettore Majorana” Tudományos és Kultúrcentrumban (Olaszország) 1981. július 1—15. között tartott előadásokat foglalja magában.

A 282 oldal terjedelmű könyv négy részre oszlik. Minden rész bevezetője egy nagyobb terjedelmű tanulmány, amelyet a témakört érintő előadások követnek. (Összesen 20.)

Az első rész (91 oldal, 7 előadás) témája: Atomok szóródása szilárd testek felületén. A bevezető előadásban V. Celli és D. Evans e folyamat elméletét tárgyalja. Levezeti a probléma Schrödinger egyenletét és behatóan foglalkozik ezek numerikus (Numerov, Gordon, prediktor-korrektor) megoldásaival. Ismerteti a torzított hullámú Born-, továbbá az eikonál és Kirchhoff-közelítéseket, a formális szóráselméleteket és ezek félklasszikus megoldásait. Ezt követően M. J. Cardillo Si(100), Si(111) és GaAs(110) felületek He-diffrakciójával kapcsolatos eredményeit ismerteti. Ezek azt mutatják, hogy e módszer kiválóan alkalmas felületi rekonstrukciók tanulmányozására. (3 előadás). K. H. Rieder előadásában tisztázza az adszorbeátum-fedett fémfelületek He-diffrakciójával foglalkozik. Elemzi a „corrugation function”-ban tartalmazott kristallográfiai információt, az ún. „kemény fal” modellt és programot közöl az inverz probléma megoldására. Eredményeket közöl Ni(110)-He esetére, ahol 2×6 és 1×2 adszorbeátum fázisok jelenlétét állapítja meg. G. Comsa előadása molekula és elektronsugár diffrakció koherenciahossz kérdéseit tárgyalja, és definiálja a műszer minimális szögfeloldásának fogalmát. Szintén He szórással foglalkozik P. Cantini előadása, azonban ő réteges TaSe₂ szerkezetekben létrejövő töltéssűrűség-hullám indukált fázisátalakulások tanulmányozására használja a módszert.

A második rész adszorbeált fázisok jellemzésével foglalkozik (57 oldal, 5 előadás). A bevezető előadást M. Bienfait tartotta, és a felületi rétegekben létrejövő fázisátalakulásokat tárgyalja. Ismerteti a kétdimenziós gáz, folyadék és szilárd fázisok jellemzőit és az idevonatkozó fázisdiagramokat, a rendezetlenségátmeneteket, a fajhő kritikus exponenseit, a jellemző 2D-fázisátmeneteket, hangsúlyozva a szilárd-szilárd C-I (commensurate-incommensurate) átmeneteket (pl. Kr-grafit rendszer, polimorfizmusokat (C₂H₆-grafit rendszer) és nem sztöchiometrikus felületi vegyületeket (pl. Fe_{2n-3}S_n az S-Fe rendszerben), a szuperkritikus folyadékokat és a felületi kristályheterogenitások hatását a fenti jelenségekre. M. W. Cole és G. Vidali előadásának témája a fizikai adszorpció univerzális törvényeinek ismertetése redukált fizikai mennyiségek függvényében. Közli az atom-felület kölcsönhatási potenciáljának analitikus kifejezéseit. A deszorpció kérdéseivel foglalkozik G. Comsa előadása, melyben elsősorban a time-of-light mérések és a Maxwell törvény által jósolt deszorbeátum energiák közötti eltérések okait kutatja. 2D-adszorbeált fázisok atomsugár-diffrakciós (ABD) módszerrel történő kutatásával foglalkozik S. Iannotta előadása, elsősorban H₂O-NaF, ill. EtOH-NaF rendszerekben. Felületi rétegeket tárgyal A. C. Levi előadása is, behatóbban foglalkozva a C-I szerkezetekkel, miközben elméleti levezetéseket közöl vakanciás, véletlenszerűen eloszló és szigetes adszorbeátumszerkezetek ABD-jével kapcsolatban. Ismerteti ezenfelül a nemrugalmas felületi szórás főbb típusait is.

A harmadik rész Felületi optikai gerjesztések spektroszkópiája, (53 oldal, 3 előadás) M. Sunjic tartalmas bevezetőjével kezdődik. Ebben behatóan tárgyalja a kristály és felületi elemi gerjesztések kontinuum és mikroszkopikus elméleteit, a felületi gerjesztések optikai spektroszkópiáját, elektronok és kollektív felületi módusok, továbbá elektronok és lokalizált rezgések kölcsönhatásait, végül pedig ismerteti a dinamikus screeningimage potenciál fogalmát. A. Otto előadása megismerteti az olvasót a felület által megnövelt Raman szórás jelenségével piridin-Ag rendszerben. Végül V. Bertolani et al. O-Ni(111) rendszer felületi fononszerkezetére vonatkozó elektronenergia-vesztés és nemrugalmas atomszórás méréseit ismerteti. Külön foglalkozik a felületi és térfogati fononok kölcsönhatásáért felelős dipól csatolással, és egyéb elméleti kérdésekkel.

A negyedik rész (73 oldal, 5 előadás) témája: Felületi fonok spektroszkópia atomszórással. J. P. Toennies bevezető előadása a felületi fononok elméletének egyes kérdéseivel foglalkozik a LiF példáján. Ismerteti a He-atom szórás előnyeit a fononspektrum meghatározásánál. Külön

fejezetben foglalkozik a nemrugalmas szórás dinamikus elméletével, a kísérleti berendezésekkel és a rezonanciák szerepével. G. Benedek előadása a felületi hullámok elméletének makroszkopikus/felületi rugalmas hullámok anizotrop is izotrop közegekben, felületi optikai fononok mint a retardált Maxwell-egyenletek megoldásai (politronok), és mikroszkopikus (Green-függvénymódszerek) aspektusával foglalkozik, összehasonlítva a két megközelítést és mindkettőjüket a kísérleti eredményekkel (KCl/001). L. Mattera és társai előadása a Ne atomok nemrugalmas szórására vonatkozó kísérleti eredményeket ismerteti, ahol az energiacsere térfogati és felületi módusokat egyaránt igénybe vesz. A hőmérséklet növelésével a több fononos folyamatok valószínűsége nő. B. Feuerbacher a fém és szigetelő felületek közötti különbségeket elemzi elméleti és a He-Cu és Ne-Ni rendszerek esetében kísérleti vonatkozásban. Ámbár a feloldás fémek esetében nem olyan kedvező, kimutatható, hogy a térfogati fonon kölcsönhatások szerepe jóval nagyobb, mint a szigetelőknél. Végül P. Cantini előadása kötött állapotú rezonanciafolyamatok szögfüggése révén határozza meg a felületi fonon diszperziós görbéket He-grafit rendszerben. Utóbbi könnyen leírható az eikonál közelítéssel, és nélküli a szórt atomok energiaanalízisét.

A fentiekből nyilvánvaló, hogy az ADB és a rugalmatlan atomszórás kísérleti technikája a szilárdtestek felület kutatás új útjait nyitja meg, és így eredményei a kutatás és anyagvizsgálat számos területén hasznosíthatók. A mű jól összefoglalja a területtel összefüggő elméleti és kísérleti eredményeket, ámbár, mint általában az ilyen jellegű munkák esetében, az egyes, speciális vonatkozások felkutatása eléggé körülményes. Ezen egy jól összeállított alfabetikus tartalomjegyzék eredményesen segíthetett volna.

(R. K.)

W. H. Marlow (ed.): Aerosol Microphysics II. Chemical Physics of Microparticles
Topics in Current Physics
Springer, Berlin—Heidelberg—New York, 1982

A mikrorészecskék gázfázisú diszperzióinak kutatása egyike napjaink legintenzívebben fejlődő interdiszciplináris kutatási területeinek, amennyiben egyrészt számot kíván adni a föld és egyéb csillagászati objektumok légkörében szubmikroszkopikus szinten lejátszódó folyamatokról, beleértve ennek időjárást meghatározó, ill. környezetvédelmi aspektusait is, másrészt magyarázni kívánja a diszperz rendszereknek a makroszkopikus rendszerektől sok esetben teljesen eltérő tulajdonságait. Mint sok egyéb interdiszciplináris területen, az e területre specializált kutatók saját terminológiát alakítottak ki, amely sok esetben eltér a jelenlegi fizika fővonalait jellemző gondolkodásmódtól. A diszciplináris kutatás azonban e területre is betört és e mű érdeme éppen abban áll, hogy az egzakts és egyetemes természettudományos gondolkodás eredményeit foglalja össze egy elsősorban empirikusnak tűnő területen.

A 189 oldal terjedelmű mű tulajdonképpen 5 tanulmányból áll, amelyek mindegyike önálló műként is megállná a helyét. A W. H. Marlow által megírt első tanulmány aeroszolok fizikai kémia-jával foglalkozik általánosságban, részletesebben tárgyalja azonban a klaszterek képződésével járó energetikai kérdéseket, a klaszterek és a sugárzási tér kölcsönhatásait, a klaszterek képződésének aktivációs vagy aktiváció nélküli folyamatait és az ezzel kapcsolatos transzportfolyamatokat.

A második tanulmány, amelyet H. B. Baltes és E. Simának írt, a „mikrorészecskék fizikája” címet viseli. A bevezetőben definiálják a mikrorészecskék részecskeméret-intervallumait, majd rátérnek a részecskeméret csökkenésével járó anomáliák (alacsony hőmérsékletű fájhő és mágneses momentum, szupravezetés kritikus hőmérséklete, olvadáspont, hősugárzás és az ún. krisztallográfiai anomália) tárgyalására. Ezután négy fejezetben külön tárgyalják a véges térfogatban foglalt ideális gázok, a dielektromos, fém- és szupravezető mikrorészecskék termodinamikai és elektromágneses anomáliái fizikai okait, érintve a Bose—Einstein kondenzációt és a Weyl problémát is.

Az I. A. Baltra által írt harmadik tanulmány felületek és felületi rétegek elektronszerkezetének számítását célzó módszereket ismerteti. Az első fejezetben általános elméleti bevezetőként a Hartree—Fock közelítéssel foglalkozik, majd rátér a különböző lokális kicserélési potenciálok ismertetésére. Ezután a Slater—Johnson SCF-Xa modell tárgyalja, majd pedig a LCAO-Xa módszerek közül elsősorban az extended tight binding-Xa módszert, az ehhez szükséges kristálypotenciálokkal együtt, ahol elsősorban az Ewald összegzést szorgalmazza. A Gauss bázisfüggvények rövid ismertetése után az ismertetett módszerek „erejét” az O_2 -Al kemizsorpció számolási és kísérleti eredményeinek összehasonlításával méri le. Itt tér ki az itt leggyakrabban alkalmazott klaszter és kétdimenziós számítások, továbbá a klaszterek lekapcsolásával kapcsolatos „embedding” beágyazási matrixformalizmusok részleteinek ismertetésére. A tanulmány hiányossága, hogy a transzfer-matrix Green-függvény és a sűrűségfüggvény (jellium) modelleket éppen csak megemlíti.

A „heterogén rendszereken végzett számítógépes kísérletek” címet viselő és J. Berne, továbbá R. V. Mikkilineni által írt negyedik tanulmány egyszerű folyadékok szerkezetének és dinamikájának megértése terén nagy sikereket magáénak mondható Monte-Carlo és molekuladinamika, továbbá a kettő előnyeit egyesítő sztochasztikus módszereket ismerteti. Jó áttekintést nyújt a módszerek lényeges vonásairól, összehasonlítva hatékonyságukat és alkalmazhatóságukat elsősorban a kezelt részecskék száma, másrészt pedig a statisztikus termodinamikai rendszerek minősége (nagy kanonikus stb. sokaságok, egyensúlyi vagy nem egyensúlyi rendszerek) alapján. A számolni kívánt problémától függően tárgyalja a szokásosabb részecskék közötti potenciálokat (merev gömb, square well, Lennard—Jones, St—2). E módszereket az aeroszolok szempontjából lényeges felületi sűrűségprofil és nyomástenzor, felületi feszültség és nukleációval kapcsolatos tulajdonságok számítására alkalmazza.

Talán P. E. Wagner: „Aerosol Growth by Condensation” c. tanulmánya viszi az olvasót közelebb a tulajdonképpeni aeroszolkutatás rejtelméhez. Ebben a kondenzáció folyamatát rész-folyamatokra, azaz a nukleációra, kondenzációs növekedésre és koagulációra tagolva tárgyalja. Az első részben sorra veszi a kvazistacionárius anyag- és hőátadási fluxus egyenleteket, a megmaradási egyenleteket és behatóan tárgyalja az anyag és hőtranszporttal összefüggő fenomenologikus egyenleteket. A második részben eltér a kontinuummodellektől és a szabad úthossztól függő (Knudsen szám) korrekciókat vezet be. Ezeket részben a Boltzmann egyenlet egzakt megoldási modelljeinél használja. pl. BGK és Shankar modellek, részben pedig szemempirikus interpolációs képleteket vezet le segítségükkel.

Úgy tűnik, hogy a könyv szerzőgárdája nem az aeroszolok specialistája, ugyanakkor azonban saját területén kitűnő szakember. A mű által nyújtott perspektívák azonban kiválóan összefonhatók éppen a specialistákat horizontjaik kiszélesítésére, de ugyanakkor érdeklődési területet képviselhetnek olyan kutatók és szakemberek részére is, akiket az anyag aeroszolállapotában rejltő kihívás és lehetőségek érdekelnek.

(R. K.)

Charles A. Weatherford and Herbert W. Jones (ed.):

ETO Multicenter Molecular Integrals

Proceedings of the First International Conference held at Florida A and M University, Tallahassee, Florida, USA, August 3—6, 1981.

D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, London

Ez a kötet az 1981. augusztus 3—6-ig Tallahasseeban (Florida, USA) megrendezett „ETO Többcentrum Integrálok” nemzetközi konferencia előadásait tartalmazza. Teljesség kedvéért tartalmaz a kötet néhány olyan előadást is, melyet csak írásban nyújtottak be.

Az ETO (Exponential Type Orbital) betűrövidítés „exponenciális típusú bázis függvényre” utal. A kvantumkémiái számítások legtermészetesebb kiinduló függvényei az atomi függvények, exponenciális típusú függvényekkel közelíthetők a legközvetlenebb módon. A fellépő többcentrum integrálok azonban ETO függvényekkel csak igen körülményesen számíthatók ki, és így az utóbbiak vizsgálata háttérbe szorult. Az ötvenes évek elején ismerték fel, hogy Gauss típusú bázis függvényekkel a többcentrum integrálok igen könnyen kiszámíthatók. A molekulafüggvények helyes reprezentálására azonban sokkal több Gauss függvény kell, mint ETO függvény. Az új, igen gyors komputer újra előtérbe állították az ETO függvényeket, illetve az őket tartalmazó molekulaintegrálokat. Ez a konferencia feladatául tűzte ki az utóbbi időkben felgyorsult munka összefüggését és áttekintését és a teendők kijelölését.

A kötetben a Bevezetést is beleértve tizenhét közleményt találunk. R. M. Pitzer a molekula integrálok kiszámításánál gömbi harmonikus függvények szerinti sorfejtéssel szerzett tapasztalatait ismerteti. E. O. Steinborn ugyanezen célra a teljes függvénytörök szerinti sorfejtéseket veszi vizsgálat alá, C. A. Weatherford pedig skálázott hidrogénszerű Sturmianokat alkalmaz, végül R. R. Sharma a Slater típusú függvényekre kifejlesztett általános sorfejtési formulát alkalmazza.

Herbert W. Jones a Slater típusú függvényeket tartalmazó integrálok egycentrumú sorfejtéssel való kiszámításának filozófiájával és stratégiájával, míg M. A. Rashid egy általánosabb függvények egy eltolt centrum körüli sorfejtésével foglalkozik. J. D. Talman impulzusnyomaték sajátfüggvények translációját numerikus gömbi Bessel transzformált függvényekkel dolgozza ki.

Egy- és többcentrumú molekulaintegrálok kiszámításának problémáival több cikk foglalkozik. H. Davis Todd és munkatársai háromcentrumú integrálokra nyertek újabb eredményeket Fourier transzformáltakon alapuló analitikus képletekkel. H. H. Michels Slater típusú bázis függvényekkel képezhető többcentrum-integráloknál a gömbi harmonikus függvények szerinti sorfejtés technikáját tanulmányozta a vektor processzoros komputer szempontjából. R. M. Pitzer az egycentrumú elekt-

ron tasztási integrálokat vizsgálja a Slater és Gauss bázis függvényekkel. B. L. Jain a többcentrumú ETO-k translációja szempontjából a bázisfüggvények hatását vizsgálja numerikus módszerekkel.

Két dolgozat foglalkozik a segédfüggvényekkel. F. E. Harris a Slater függvényeknél szereplő Si, Ci és Ei függvényeket, míg M. Randić a molekulaintegrálokban szereplőket veszi szemügyre.

P. Habitz és E. Clementi nagy molekuláris rendszerek matrixelem eloszlását a számolhatóság szempontjából, I. I. Guseinov a Neumann sorfejtésnek a többcentrum-integrálok számításában betöltött szerepét, míg Kor-Fong Lee atom alak faktorok segítségével a diszperziós energia számítását vizsgálja.

A konferencia és az itt közölt anyag jelentősen meg fogja gyorsítani az ezen a téren végzett munkát. A könyv igen jól és szép külalakban prezentálja az anyagot, melyet a kvantumkémia, molekulafizika művelőin túl mindazok haszonnal forgathatnak, akik az itt közölt speciális matematikának hasznát veszik, pl. alkalmazott matematikusok, mérnökök. A felvetett problémák a tiszta matematika híveinek is még sok szép feladatot jelenthetnek.

Gáspár Rezső

**G. Höhler (ed.): Landolt—Börnstein New Series I/9/b/2:
Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles
Methods and Results of Phenomenological Analyses
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York, 1983**

Az elemi részecskék kölcsönhatásait tanulmányozó mérések száma olyan ütemben növekszik, hogy az adatoknak átlagosan tíz éven belül szükségessé válik új összefoglalása. Különösen érvényes ez a rugalmas és töltéscsere szórásokra. Ezek a reakciók ui. viszonylag egyszerűbb detektorokkal tanulmányozhatók és így a szisztematikus hiba lehetősége az átlagosnál kisebb, ez pedig az egyre nagyobb statisztikus pontosság elérésére ösztönöz. Másrészt ugyancsak egyszerűségükön fogja itt várható leginkább, hogy elméletileg, legalábbis fenomenologikus szinten megfelelő leírást kaphassunk a hadronikus ütközésekre vonatkozóan. Bármely új gyorsítón, amely egy addig ismeretlen energia-tartományba nyújt bepillantást, biztosan terveznek mérést rugalmas szórásra.

A Landolt—Börnstein sorozatnak is, amelynek célja, hogy a tudomány és technika területén kapott ismereteket táblázatok és függvénykapcsolatok formájában összegezze és tegye közkincsé a fenti szempontokat természetesen figyelembe kellett venni. Ezért az 1973-ban megjelent I/7 kötetet kiegészítették új adatokkal. Az így létrejött I/9 kötet két részre oszlik. Az a) rész 1980-ban jelent meg, és a πN , valamint a $K N$ szórás adatait tartalmazza. A b) rész első fele 1981-ben jelent meg, és a πN szórás primér adatait gyűjtötte össze. A b) rész második fele, jelen ismertetés tárgya, ezeknek az adatoknak a fenomenologikus analízisével foglalkozik 600 oldal terjedelemben.

Az *alacsony energiás* adatok analízise a parciális hullámok módszerével történik. Ennek kiterjedt irodalmát a 2.1 fejezet, eredményeit a 2.2 fejezet ismerteti. A parciális hullámok módszerével le származtatott paraméterek természetesen több, független kísérlet adataira épül, így a paraméterekből visszaállított mérhető mennyiségek, mint pl. a differenciális hatáskeresztmetszet vagy polarizáció, igen pontos, a szisztematikus hibákra általában kiátlagolt számadat. Ezeket tartalmazza a 2.3 fejezet. A 2.4 fejezet számos további, „nem standard” eredményét foglalja össze a parciális hullámok analízisének, mint pl. a πN rezonanciák paraméterei, mezon nukleon csatolási állandók, invariáns amplitúdók értékei a külső közelében és a nemfizikai tartományban, hogy csak néhány fontosat említsünk meg közülük. A πN és $\pi N \bar{N}$ amplitúdókból nyerhető információt a 2.5 fejezetben szerző összeveti a πN rendszer leírására használt legismertebb modellekkel.

A *nagyenergiás adatok* fenomenologikus analízise természetesen nem végezhető el a parciális hullámok fenti analízisével, azok igen nagy száma miatt. Az itt használatos leírásmódok (impakt paraméter formalizmus, s- és t-csatornás modellek, Regge-trajektóriák, geometriai és statisztikus modellek stb.) összefoglalását tartalmazza a mintegy 100 oldalas 2.6 fejezet. Bár ez a rész felsorolja a model paraméterek legjobb értékeit is, a hangsúly itt inkább a modellek kritikájára fordítódik.

A könyvet egy igen részletes (80 oldal) bibliográfia, végül a πN szórás formuláinak gyűjteménye zárja. Ez utóbbi egy különálló kézikönyvnek is tekinthető, amely egyrészt pontos matematikai háttérrel szolgál a könyvben felsorolt adatoknak, másrészt kiváló kalauz a témában kevésbé járatos olvasónak.

G. Höhler a részecskefizika érintett ágának egyik legjelentősebb szakembere. Könyve nagymértékben hozzájárul ahhoz, hogy a πN szórás kísérleti adatai rendszerbe foglaltan álljanak rendelkezésre a témában érdekelt kutatóknak.

Nagy Elemér

Landolt—Börnstein II/14a: Molekuláris állandók
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York, 1982

A Molekuláris állandók c. kötet a Landolt—Börnstein sorozat II/14 kötete (amely két alkötetből áll), az 1974-ben megjelent II/6 pótkötete és kibővítése, és így az 1967-ben megjelent II/4 kötet második pótkötete.

A II/4, II/6 és II/14 kötet együttesen az 1982-ig közölt, a klasszikus, valamint a modern spektroszkópi módszereivel nyert állandók kritikusan értékelt komplett gyűjteménye.

A jelen kötetet technikai okokból kettéosztották. A jelen alkötet (a) tartalmazza az általános bevezetőt és a diamágneses molekulák táblázatait. A II/14 b alkötet az (a) alkötetben tárgyalt molekulák struktúra diagramjait, a szabad gyökök táblázatait és az anyagok jegyzékét fogja tartalmazni.

A jelen kötetben (II/14 a) közölt spektroszkópiai információkat főként gázfázisú mikrohullámú mérésekből nyerték. A kötet tartalmazza továbbá azokat a gázfázisú adatokat, amelyeket olyan koherens sugárforrást alkalmazó módszerekkel határoztak meg, amelyek összefüggésben vannak a mikrohullámú spektroszkópiával. Ezek közé tartoznak a molekuláris-sugár technikák, a rádiófrekvenciás spektroszkópia, lézer spektroszkópia, dupla rezonancia technikák. Néhány egyéb módszerrel nyert adatot is figyelembe vettek a kötet szerkesztői, amennyiben az így nyert paraméterek pontossága összehasonlítható volt a mikrohullámú spektroszkópiával nyert adatokéval (pl. Fourier infravörös spektroszkópia).

A 788 oldalas kötet 1. fejezete általános bevezető 5 oldal terjedelemben, a 2. fejezet tartalmazza a diamágneses molekulák állandóit táblázatokban, valamint a referenciákat, összesen 783 oldal terjedelemben.

A 2.2—2.5 fejezetben a molekulákat rotációs spektrumok alapján rendezték: kétatomos molekulák (2.2), lineáris molekulák (2.3), szimmetrikus pörgettyű molekulák (2.4), aszimmetrikus pörgettyű molekulák (2.5). A táblázatok rotációs állandókat, centrifugális torzulási állandókat, rotációs-vibrációs kölcsönhatási állandókat és I-típusú felbomlási állandókat tartalmaznak, továbbá egyéb mikrohullámú típusú módszerekkel nyert állandókat is.

A molekulák dipólus momentumait a 2.6 fejezet, mag-kvadrupolus csatolási állandóit a 2.7 fejezet, gátolt rotációs állandóit a 2.8 fejezet és mágnese kölcsönhatási állandóit a 2.9. fejezet tartalmazza.

W. A.

Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relations
in Science and Technology, New Series, Group III, Volume 12, Subvolume b.
Phonon States of Alloys-Electron States and Fermi Surfaces of Strained Elements
Springer-Verlag—Berlin—Heidelberg—New York

A sorozat III csoportja fémekre vonatkozó adatok gyűjteménye. A 13. kötet elektron, fonon-állapotokra és Fermi felületekre vonatkozó 1981-ig megjelent adatokat tartalmaz, az alkötetbesorolás nem tematikai jellegű, hanem idősorrendet tükröz.

A 405 oldal terjedelmű mű első 258 oldala a Fermi-felületek feszültség és deformáció függésével, továbbá az állapotsűrűségenergia diagramok és az elméleti és kísérleti úton kapott sávszerkezetek a térfogat és rácsparaméterektől való függésével kapcsolatos 346 ábrát és 168 táblázatot tartalmaz. Az elméleti bevezető után következő „Survey” c. fejezet a legalkalmasabb a tájékozódásra. Az adatok fémekre vonatkoznak, melyek közül az Al, Bi, Ca, Cs, Sb és Zn vannak legbővebben képviselve. Az elméleti számításokat többnyire tight binding, cellular, APW, OPW, KKR és LCAO, illetve ezek relativisztikus és SCF továbbfejlesztéseire alapuló módszerekkel végezték, a kísérleti módszerek közül a Subnyikov—Hasas, a Haas—van Alphen effektusok mérései, továbbá termo és galvanomágneses, optikai spektroszkópiai, magnetotriktikus, pozitron annihilation és ultrahang csillapítás mérések érdemelnek említést. A referenciák száma kb. 400.

A mű 2-ik részében (147.) fémek szerkezetű anyagok rácsrezgéseivel kapcsolatos eredményeket találhatunk. Közismert a rácsrezgések kapcsolata egy sereg fizikai mennyiséggel és folyamattal, pl. hőkapacitás, elektromos ellenállás, szupravezetés, hővezető képesség, hőkiterjedés. A rácsrezgések elméletét, a diszperziós görbék számítási módszereit a felöltelt anyagtípusokat tárgyaló rövid bevezető után az érdemi részben 6 anyagtípussal kapcsolatos, főként neutrondiffrakciós méréseken alapuló fonondiszperziós és egyfononos állapotsűrűség görbékkel, time of flight spektrumokkal, ritkábban a frekvenciák és vonalszélességek hőmérséklet függéseivel kapcsolatos adatokat találhatunk (315 ábra, 16 táblázat). Szerencsés, hogy sok esetben az elméleti, pl. erőkonstans-, árnyékolt merev ion-,

árnyékolt héj-, árnyékolt lélegző héj-, árnyékolt kettős héj módszerekkel számolt és a NMR méréseken alapuló diszperziós görbék egy ábrán kapnak helyet. Az anyagtípusok (zárójelben egy illusztris képviselőjükkel) a következők: 1. refrakter NaCl szerkezetű anyagok (TiN, 24 anyag, 46 ábra); 2. kevert vegyértékű NaCl típusú ($\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$), Cu_3Au típusú ($\text{Ni}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}$), bronz ($\text{Ti}_{0.33}\text{WO}_3$), Laves fázisú (MgZn_2), Chevrel fázisú ($\text{Cu}_{1.56}\text{Mo}_6\text{S}_{8.12}$) és egyéb (Mg_2Pb) anyagok (30 anyag, 55 ábra); 3. réteges kristályszerkezetű anyagok (IT-TiSe₂) 4 anyag, 10 ábra); 4. lineáris vezetők (Nb_3Sn , TTF—TCNO 15 vegyület, 36 ábra); 5. H-fém kevert fázisok ($\text{PbD}_{0.13}$, 24 anyag, 61 ábra); 6. a rendezetlen ötvözetek fcc ($\text{Cu}_{1-x}\text{Be}_x$), bcc (V_{1-x}O_x) hcp ($\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x$), továbbá az invar ötvözetek ($\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$) (59 anyag, 107 ábra).

A kötetben található adattömeg számos gyakorlati és elméleti vonatkozásával kiváló segítséget nyújthat pl. a magashőmérsékletű vezetők és a sztöchiometria függvényében változó átalakulási hőmérsékletű szupravezetők, a sztöchiometria függvényében változó keménységű anyagok kutatásában. Elméleti vonatkozásában segítséget nyújthat az elektron-fonon kölcsönhatással kapcsolatos kérdések pl. az akusztikus gyengítés, a szupravezetés, a változó vegyértékállapotok, továbbá a diszperziós görbék szingularitásaival kapcsolatban felmerülő kérdések vizsgálatához.

R. K.

**Landolt—Börnstein: Group III, 17 b,
Physics of II—VI and I—VII compounds, Semimagnetic Semiconductors
Springer-Verlag, Berlin—New York, 1982. 543 oldal**

A Landolt—Börnstein sorozat 17. kötete 9 alkötetben részletesen tárgyalja a félvezetők adatait. 1982 során az első két alkötet: 17 a és 17 b jelent meg. A 17 a a IV-es oszlop elemeivel és a IV—IV, valamint a III—V vegyületekkel foglalkozik. A további 17 c—17 i alkötetek a legkülönbözőbb félvezetők fizikai adatai mellett félvezetőtechnológiai kérdéseket is tárgyalnak (a 17 c és 17 d kötet).

A 17 b alkötet a II—VI és I—VII típusú félvezetők fizikai adatait ismerteti: részletesen foglalkozik a következő anyagokkal: MgO , CaO , SrO , BaO , ZnO , ZnS , ZnSe , ZnTe , CdO , CdS , CdSe , CdTe , HgO , HgS , HgSe , $\gamma\text{-CuCl}$, $\gamma\text{-CuBr}$, $\gamma\text{-CuJ}$, AgF , AgCl , AgBr , AgI .

Külön fejezet közli az ún. szemimágnéses félvezetők (közönséges félvezető — mágnéses félvezető szubsztitúciós szilárd oldata) adatait.

Kiemelendő, hogy a 17. kötet nemcsak a szűken vett félvezető adatokat adja meg, hanem minden olyan adatot, amire egy adott félvezetővel kapcsolatban szükség lehet.

A kötet vegyületenként általában a következő adatokat közli: elektrontulajdonságok (sávszerkezet, állapotsűrűség, exciton adatok, átmeneti energiák, effektív tömegek, g-faktorok, deformációs potenciálok stb.); szennyező- és hibahely állapotok (sekély és mély állapot, kötött excitonok, lokális módusok); rács adatok (rácsparaméter, hőkitérés, fonon diszperzió, hangsebességek, rugalmassági és egyéb modulusok stb.); transzport jelenségek (vezetőképesség, töltéshordozó koncentráció, mozgékonyág galvanomágnéses jelenség, piezoelektromosság, Seebeck és Nerst együttható stb.); optikai tulajdonságok (abszorpció, reflexió, statikus és dinamikus dielektromos állandók, optikai spektrumok, Raman és Brillouin szórás, elektron energia veszteség, Schottky gát magasság stb.); egyéb adatok (hővezetés, olvadáspont, Debye hőmérséklet, sűrűség, keménység, mágnéses szuszceptibilitás stb.).

J. J.

**K. H. Bennemann, F. Brouers, D. Quitmann (szerk.): Ionic Liquids, Molten Salts
and Polyelectrolytes
Lecture Notes in Physics, vol. 172, Proceedings, Berlin (West), 1982.
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York, 1982.**

A 253 oldal terjedelmű mű 33, lényegében cikkszerű közlemény gyűjteménye, amely a területen elért legújabb eredmények összefoglalására tesz kísérletet. A bevezető cikkben N. F. Mott a minimális fémes vezetőképeség kutatásának területén elért kísérleti és elméleti eredményekről számol be. Az ezt követő 162 oldalon 20 cikk foglalkozik az ionos folyadékokkal kapcsolatos eredmények ismertetésével. A cikkek anyag szerinti besorolása a következő (zárójelben a közlemények száma): egyes kétkomponensű plazmák (3), fém-félvezető-ionos vezető határeset anyagok, pl. CsAu , Li_4Pb , NiTe_x , (10), ionos olvadákok (4), Na-NH_3 -rendszer (2), kevésbé ionizált molekuláris folyadékok, pl. H_2O , SiO_2 , (1). A közlemények zöme kísérleti indítatású, azonban sok esetben e kísérleti anyaghoz színvonalas elméleti tárgyalásmód párosul. A kísérletek között a magspin-rács relaxáció, neutrondif-

frakció, Brillouin szórás, elektromotoros erő, elektromos transzport, mágneses szuszceptibilitás és optikai abszorpció mérések szerepelnek legnagyobb számban. A mért mennyiségek struktúrafaktorok, Knight-eltolódások, spin-flip hatáskeresztmetszetek, F-centrum abszorpciók, elektromos vezetőképesség hőmérséklet és összetétel-függései, aktivitási együtthatók, szolvatációs energiák, „excess” termodinamikai mennyiségek stb. A mérési eredmények értelmezésére igénybe vett, ill. kifejlesztett elméleti módszerek, modellek közül a Coulomb-farokkal ellátott merev gömb, ill. árnyékolt Yukawa jellegű atomok közötti potenciálokkal számított struktúrafaktorok és pár korrelációs függvények, az általánosított Langevin-egyenleten alapuló Mori—Zwanzig memóriafüggvényanalízis, egyéb számítógépes szimuláción alapuló molekuláris dinamikai számítások, a kémiai egyensúlyi elméletek, az egy- és kétkomponensű plazma modellek, a sűrűségfüggvény módszer, a Mott—Anderson—Hubert-modell érdemelnek említést.

Már a cikkek anyagok szerinti eloszlásából is látható, hogy a legnagyobb érdeklődés az ún. „határeset” vezetési tulajdonságú anyagokat kísérté. Az egyes komponensek elektronegativitásától függően ezen anyagok bizonyos összetételeknél elektronvezetéből ionos vezetővé válhatnak, az alkáli atomok elektronjait leadhatják pl. az Au-atomnak, és eközben a transportkoefficiensek és a termodinamikai változók értékei, pl. a parciális moláris térfogatok drasztikusan változnak. Nyilvánvaló, hogy ezek az anyagok a jövőben számos technikai kérdés megoldásában egyre nagyobb szerephez fognak jutni. A szerzőgárdát többek között A. P. Copestake, E. Evans, J. P. Hansen, M. P. Tosi, W. W. Warren és K. G. Weil fémjelzi.

A 81 oldal terjedelmű második részben a polielektrolitokkal kapcsolatos 8 közlemény kapott helyet. Az érintett anyagok poliszulfonátok, ill. ezek modelljei (egyenletesen töltött nem merev molekulalánccok), gömbalakú Brown részecskék, transzfer RNA (mint monodiszperz modell), DNA mint ellenionkötő szubsztátum és végül fehérjemembránok. Az alkalmazott mérési technikák felölelik az NMR, a pulzáló térgradiens NMR, a light-beating spektroszkópia és viszkozitásméréseket. A cikkek nagymértékben elméleti beállítottságúak. A terítékre kerülő főbb kérdések a következők: a sztatikus és dinamikus struktúrállandók, továbbá az ún. köztes szórási függvény számítása a Fokker—Planck, ill. Ornstein—Zernike-egyenletek segítségével, a polielektrolit konformációk és az ellenionok eloszlásának számítása a Debye—Hückel, Poisson—Boltzmann, klaszter és az itt kifejlesztett ún. féregszerű lánc modellek, továbbá a kondenzáció-elmélet segítségével, végül pedig az ellenion öndiffúziós állandók, térfogatkiszorítási effektusok, és perzisztenciahosszak számítására kidolgozott változatos módszerek.

A mű egészéről igen nehéz véleményt kialakítani, mert a hozzá hasonló gyűjteményes munkákkal együtt az érintett területek „pillanatnyi felvételek” segítségével rögzített állapotát tükrözi. Jól illusztrálja, hogy egy nagy forrásban levő tudományág esetében is a különböző rendszerek mögött meghúzódó fizikai lényegnek között nagymértékű hasonlóság áll fenn. A könyv egyaránt hasznos lehet a plazmák, fémek, félvezetők, ionos oldatok és olvadékok, biológiai és egyéb makromolekulák kutatása területén tevékenykedő gyakorlati és elméleti beállítottságú szakemberek számára.

R. K.

U. Nigul and J. Engelbrecht (editors): *Nonlinear Deformation Waves*
IUTAM Symposium, Tallin, Estonian SSR, 1982.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1983. 453 oldal

A könyv az azonos című IUTAM (International Union of Theoretical and Applied Mechanics) szimpóziumon elhangzott 14 összefoglaló előadás és 31 rövid referátum szövegét tartalmazza.

A hullámok, különösen a nemlineáris hullámok a fizikai — általánosabban: a természeti — jelenségek igen széles spektrumát fogják át; hogy csak néhányat említsünk: hullámok terjedése a földkéregben, az óceánokban, a légkörben, a biológiai rendszerekben; akusztika (beleértve a zenei hallást, a teremakusztikát, az infra- és az ultrahangokat); elektromágneses hullámok terjedése különböző (nemlineáris) közegekben; nemlineáris optika stb.

A tudományos bizottság a következő témák megvitatását javasolta a szimpózium szervező bizottságának:

- szilárdtestek és folyadékok nemlineáris matematikai modelljei;
- a nemlineáris hullámterjedés leírásának analitikus (aszimptotikus) és numerikus módszerei;
- inverz problémák;
- kísérleti vizsgálati módszerek és alkalmazások (roncsolásmentes anyagvizsgálat, biomechanika, geofizika stb.).

A szimpózium szakmai programjának megfelelően a könyv egy (nagyobbik) része a hullámok (elsősorban a nemlineáris hullámok) terjedésének és tulajdonságainak a matematikai leírásával

foglalkozik. Néhány dolgozat témája speciális hullámtani probléma megoldása. Fontosságának megfelelően több dolgozat foglalkozik a hullámjelenségek kísérleti vizsgálati módszereivel: szilárdtestekben, folyadékokban és gázokban terjedő deformációs hullámokkal. Végül néhány szerző az elektromágneses hullámok „deformációjának”, nemlinearitásának a vizsgálatában elért eredményeit ismerteti.

A recenzens teljes mértékben egyetért a szimpózium szervező bizottságának az epilógusával: „Ez a szimpózium a IUTAM nemlineáris hullámjelenségekkel foglalkozó rendezvényeinek a sorozatát kívánta felújítani. Reméljük, hogy a szimpóziumok gyakorisága nemlineárisan növekedni fog, s hogy nem kell újabb öt esztendeig várni a következő, ilyen témájú konferenciára.”

A szép kiállítású, gazdag tartalmú könyvet a recenzens melegen ajánlja a mérnökök, fizikusok, biofizikusok széles rétegének: azoknak, akik hullámjelenségek elméleti és kísérleti vizsgálatával vagy alkalmazásaival foglalkoznak.

Szabó János

L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw (editors):

Turbulent Shear Flows 3.

Selected Papers from the Third International Symposium on Turbulent Shear Flows

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981. 321 oldal

Az utóbbi években rendkívüli mértékben megnőtt a turbulenciával foglalkozó dolgozatok és könyvek, továbbá az e tárgykörben szervezett konferenciák száma. A turbulencia iránt megnövekedett érdeklődés nem csupán a téma gyakorlati fontosságával és a tárgykörben elért — túlzás nélkül mondhatjuk: meglepő — eredményekkel magyarázható, hanem azzal is, hogy a turbulencia vizsgálatának elméleti és kísérleti módszerei a fizika (a műszaki gyakorlat, a biológia stb.) más területein is alkalmazhatók. A témával foglalkozó konferenciák kiadványai — többek között — azért is hasznosak, mert a tárgykör szerteágazó volta (és bonyolultsága) miatt részleteiben egyetlen kutató már képtelen áttekinteni a turbulencia vizsgálatának és leírásának elméleti és kísérleti módszereit.

A konferencia szervező bizottsága és a könyv szerkesztői dicséretes módon a kötetben azokat az előadásokat adják közre, amelyek átfogó áttekintést adnak a téma legújabb eredményeiről és más tudományágakkal való kapcsolatairól.

A könyv négy fejezetre oszlik: áramlások merev falak mentén (hét dolgozat); skaláris transzport (öt dolgozat); recirculációs áramlások (hat dolgozat); a turbulencia elméleti és numerikus módszereinek alapjai (hat dolgozat). A könyv használhatóságát — különösen a témával ismerkedő kutatók számára (de nem csak ő számukra) — nagymértékben növelik a könyvben szerényen „bevezető megjegyzéseknek” (introductory remarks) nevezett nagyon tanulságos, információgazdag összefoglalások.

A recenzens melegen ajánlja a könyvet mindazoknak, akik turbulenciával, vagy általánosabban nemlineáris jelenségekkel foglalkoznak, ill. e téma iránt érdeklődnek.

Szabó János

J. Pedlosky: Geophysical Fluid Dynamics

Springer-Verlag, Berlin—New York—Heidelberg, 1979. 624 oldal

A folyadékok mechanikája a természeti jelenségek széles skáláját öleli át. Az áramlástan fejlődésének a kezdeti szakaszában a geofizikai áramlástan is néhány „kézenfekvő” áramlással foglalkozott: vízhullámok, áramlások egyszerű alakú testek körül, majd az atmoszférában és az óceánokban, ill. később a Föld belsejében lejátszódó áramlások vizsgálatával. Az utóbbi évtizedekben az áramlástan, ezen belül a geofizikai áramlástan témaköre lényegesen kibővült.

J. Pedlosky könyve e széles körű téma egyik, fontos részével foglalkozik: az atmoszféra és az óceánok geosztrófikus áramlásaival, pontosabban ezen áramlások olyan típusaival, amelyekben a Föld forgásának, ill. a földforgásból származó centrifugális- és Coriolis-erőnek lényeges szerepe van. Az ilyen áramlásokban a karakterisztikus hosszúság néhány kilométer, az időskála pedig néhány nap nagyságrendű.

A könyv, a téma sok olyan részletével foglalkozik, amely mégcsak szakfolyóiratokban hozzáférhető, s ezért (is) speciális posztgraduális kurzusok standard kézikönyvként használható. Az ilyen kurzusok — és ennek megfelelően a könyv tartalma is — a hidrodinamika alapjainak az ismertetésével kezdődnek, majd — a kurzus jellegétől függően — az óceánok és az atmoszféra dinamikájával folytatódnak, s végül a hullámjelenségek, az instabilitások, a turbulencia kurzusok témája.

J. Pedlosky könyve e szerteágazó téma viszonylag kis részével foglalkozik: a teosztrofikus egyensúly, a Rossby-hullámok leírásával, a homogén óceánban kialakuló cirkulációkkal és a baroklinikus instabilitásokkal. Rövid fejezetbe tömöríti a szerző a hosszú gravitációs hullámok, a hullámfront kialakulása és a stacionárius cirkuláció ismertetését.

A nemlineáris effektusokat a szerző a határréteg-áramlások, a hullám—hullám-kölcsönhatások és a baroklinikus instabilitások példáján ismerteti. Az erős instabilitások tárgyalása a könyvben — a téma fontosságához viszonyítva — fájdalmasan rövid. Hasznos lett volna, ha a szerző a speciális összetettebb problémák tárgyalása előtt — mint egy előkészítésként — néhány egyszerűbb feladat megoldásával is foglalkozik (Pl. Kelvin-féle hullámok, tengerhullámok a Föld gravitációs terében). Ezáltal a könyv többeknek adott volna indítékot, kedvet és inspirációt a témával való foglalkozáshoz. Ennek hiányában a könyv elsősorban a téma (leendő) specialistáinak és speciális kurzusok kézikönyvéül ajánlható.

Szabó János

H. H. Fernholz and E. Krause (editors): Three-Dimensional Turbulent Boundary Layers
IUTAM Symposium, Berlin, 1982. Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York,
1982. 289 oldal

Az International Union of Theoretical and Applied Mechanics (IUTAM) vezetősége harmadik alkalommal szervezett konferenciát a turbulens határrétegek témakörben. Az előző két szimpóziumnak (Berlin, 1972; Trondheim, 1975) azonban csak európai résztvevői voltak; a harmadik konferenciára (bizonyára az amerikai és a japáni kutatók e tárgykörben elért eredményeit méltányolván) Európán kívüli kutatókat is meghívtak. A kötet a konferencián elhangzott előadásokat adja közre. (A harminc előadásnak pontosan a felét az Amerikai Egyesült Államok, ill. Japán szakemberei tartották.)

Az előadások döntő többsége (a szervező bizottság célkitűzéséhez igazodva) a következő témákkal foglalkozott: a turbulens áramlások speciális („gazdaságos”) számítási módszerei, a fluktuáló mennyiségek mérési módszerei, a háromdimenziós határrétegbeli mennyiségek speciális mérés-technikája.

A könyv „használatosságát” nagymértékben növelik, a megértést lényegesen segítik az egyes előadások szövegének a végén olvasható rendkívül világos, tartalmas összefoglalások (conclusions, concluding remarks).

A kötet szerkesztői szerint „a konferencia résztvevői egyetértettek abban, hogy az eddigi mérési módszerek és eredmények nem adnak elegendő információt egy elfogadható turbulencia-modell megalkotására. A numerikus módszerek eredményei vagy a mért átlagsebességgel, vagy a turbulens sebességgel egyeznek (kvalitatív), de a mindkettő számítására alkalmas matematikai módszerek kidolgozása még várat magára. Ennek oka — a konferencia résztvevőinek a véleménye szerint — nem annyira a számítástechnikai módszerekben, mint inkább a turbulencia-modellek túlzott egyszerűségében keresendő”.

A recenzius nem annyira borúlátó. A kaosz-elméletben elért legújabb eredmények, de a kötet tartalma alapján is indokoltnak látszik az az „optimizmus”, hogy nem vagyunk messze a turbulencia „rejtélyének” végleges megoldásától. A probléma megoldását volt hivatva segíteni a IUTAM harmadik határréteg-konferenciája és a konferencián elhangzott előadásokat tartalmazó (izléses kiállítású) kötet. A recenzius szívesen ajánlja a könyvet mindazoknak, akik turbulenciával, kaosz-elmélettel, általában áramlástannak és az áramlástan mérési módszereivel foglalkoznak.

Szabó János

E. Krause (ed.): Proceedings of the Eighth International Conference on Numerical Methods
in Fluid Dynamics
Lecture Notes in Physics, 170.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982. 569 oldal

A Lecture Notes in Physics sorozat 170. kötete az Aachenben 1982-ben rendezett konferencia előadásait tartalmazza: hat összefoglaló előadást és hatvanöt referátumot. A referátumok kilenc szekcióban hangzottak el: a Navier—Stokes egyenletek megoldásai; az Euler-egyenletek megoldásai; az Euler-egyenletek megoldásainak pontossága; gázdinamika; hangsebességnél nagyobb sebességű áramlások; átmeneti és turbulens áramlások; belső áramlások; erős cirkulációk; határrétegek.

A referátumok mintegy katalógizálják a témakörben elért legújabb eredményeket, az összefoglaló előadások viszont rendkívül széles körű és gondolatébresztő áttekintést adnak a téma fontosabb részterületeiről.

E. Krause, a kötet szerkesztője az előszóban a következőket írja: „Az International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics Szervező Bizottságának állandó tagjai azért rendezték Aachenben a nyolcadik konferenciát, hogy tisztelettel adózzanak azon kutatók — közöttük első-sorban von Kármán és Treffitz — emlékének, akik a század elején az áramlástan modern matematikai módszereinek a kidolgozásában és továbbfejlesztésében úttörő munkát végeztek. ... Az Aacheni Aerodinamikai Intézet munkatársai által írt áramlástani könyv ma is a legalapvetőbb mű a gázdinamikában.”

Th. von Kármán több évtizeden át volt az Aacheni Aerodinamikai Intézet igazgatója és gázdinamikai konferenciák szervező bizottságának az elnöke. A nyolcadik konferencia előadásait tartalmazó kötetből a téma specialistái széles körű információt kaphatnak az áramlástan numerikus módszereinek legújabb eredményeiről, a hidrodinamika iránt érdeklődő fiatal kutatók pedig — főleg az összefoglaló előadások révén — inspirációt a témával való foglalkozásban.

Szabó János

Roger Peyret and Thomas D. Taylor: Computational Methods for Fluid Flow
Springer Series in Computational Physics
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1983. 258 oldal

Az utóbbi években szinte sorozatban jelennek meg a hidrodinamika numerikus módszereivel foglalkozó könyvek. Ezek között R. Peyret és Th. D. Taylor könyve egyike a legkiválóbbaknak.

A hidrodinamika alapegyenleteinek tömör összefoglalása után a kötet három fejezetben ismerteti az áramlástan egyenleteinek numerikus megoldási módszereit. Az egyes módszerek lényegét előbb egyszerű példákon mutatják meg a szerzők, azután következnek a bonyolultabb alkalmazások. Nem mulasztják el a különböző megoldási módszerek összehasonlítását, a közelítések „jóságának” a megvizsgálását. Rendkívül hasznosak az egyes fejezetek elején olvasható tömör, de világos összefoglalások.

A kötet első fejezete a hidrodinamikai numerikus módszerek általános, alapos ismertetésével foglalkozik, az utolsó két fejezet témája az első fejezetben részletesen ismertetett módszerek hidrodinamikai alkalmazása. (Összenyomhatatlan folyadékok áramlása; összenyomható folyadékok áramlása.) A kötet végén gondosan összeállított, részletes tárgymutató található.

A szöveg fogalmazása és gondolatmenete mindvégig kristálytisztán világos; a szerzők nagy gondot fordítottak a fokozatosságra is.

A recenzius melegen ajánlja a könyvet a hidrodinamikával, gázdinamikával foglalkozó fizikusoknak és mérnököknek, — „kezdőknek” és „haladóknak” egyaránt.

Szabó János

Gerhard Fieck: Symmetry of Polycentric Systems
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1982

Wigner Jenő úttörő munkássága óta közismert, hogy a csoportelmélet milyen fontos alkalmazásra talált a kvantumrendszerek szimmetriáinak leírásában. A forgáscsoport, a Lorentz-csoport és a szimmetrikus csoport legfontosabb tulajdonságainak ismerete a gyakorló fizikus számára ma már alapkövetelmény.

A molekulák szerkezetét kutató fizikusok és kémikusok számára ugyanilyen alapvető fontosságúak a különféle pontcsoportok, amelyek a molekulák dinamikai szimmetriáit írják le. Gerhard Fieck munkájának tárgya a molekulák, mint sokcentrumú rendszerek szimmetriáinak részletes analízise a csoportelmélet teljes fegyvertárának használatával.

A könyv első része röviden összefoglalja a Wigner—Racah-algebra pontcsoportokra történt általánosításának legfontosabb eredményeit. A továbbiakban az alapvető cél az atomszerkezet (egycentrum probléma) tárgyalásánál követett eljárás általánosítása molekulák (sokcentrum rendszerek) esetére. E módszernél a releváns fizikai mennyiségek a Wigner—Eckart-tétel alapján a szimmetria-csoportra jellemző „geometriai” együtthatók leválasztásával a különböző elektronpályák redukált mátrixelemeivel fejezhetők ki.

Molekulák esetén a fő nehézséget a rendszer szimmetriájához illeszkedő elektronpályák megismerése mellett a redukált mátrixelemek minél egyszerűbb formában történő meghatározása jelenti. A szerző új eredményei ezzel az alapvető problémával kapcsolatosak és részletesen tárgyalják

a két-, három és négycentrum-integrálok különböző alakjait és transzformációs tulajdonságait. A tárgyalás egyszerűsítése céljából a hagyományos módszer helyett a szerző a molekulaváz azonos atomjaiból alkotott élek, háromszögek és általában poliéderek által indukált pontcsoport-ábrázolásokat igyekszik felhasználni a különböző redukált mátrixelemek megszerkesztésére.

A könyv kétségtelenül sok hasznos információt tartalmaz a szakterület specialistái számára. A tárgyalásmód azonban nehézkes és rendkívül formális. Bár a téma túlnyomóan matematikai jellegű, az eredmények fizikai jelentőségének nagyobb hangsúlyozása lenne kívánatos. Ez különösen észrevehető az egyes fizikai közelítések (Wolfsberg—Helmholtz, Mulliken közelítés, valence-bond módszer) tárgyalásánál. Fentiek miatt az átlag olvasó számára a könyv igen nehéz és fárasztó olvasmány.

Feltétlenül meg kell említeni egy, a könyv kiállításával kapcsolatos, rendkívül zavaró körülményt. A könyvben végig azonos szimbólum (i) használatos az ábécé kis i betűjének, valamint az egy számnak a jelölésére. A zavart tovább növeli az is, hogy i jelölheti a képzetes egységet is, tehát a képletek értelmezése nagy óvatosságot igényel. Elrettentő példaként említhetők a sok közül a (3.8), (3.11) vagy a (14.5) képletek, ahol egyetlen kifejezésben ugyanaz a szimbólum több jelentéssel bír.

Mindent összevetve, a könyv az említett hiányosságai ellenére értékes munka, de haszonnal csak a témában járatos olvasó forgathatja.

B. Gy.

S. Ezekiel and H. J. Arditty (ed.-s): Fiber-Optic Rotation Sensors and Related Technologies

A Springer Verlag optikai sorozatának 32. kötete a könyv címe által meghatározott témában 1981-ben megrendezett első nemzetközi konferencia előadásainak anyagát tartalmazza.

A gyakorlati élet legkülönbözőbb területein lép fel növekvő igény abszolút forgás mérésére. Különösen az optikai módszerek, ezek között pedig a „gyűrűlézer” giroszkópok iránti érdeklődés igen nagy a navigáció, a földrajzi koordináták pontos meghatározása, a Föld északi és déli pólusa mozgásának, (pr. precessziós) továbbá földrengések okozta torziós oszcillációinak kimutatása stb. területén. Ezen eszközökben egyre inkább felcsévélt optikai szálakat használnak fel az érzékenység növelésére.

Egy az alapismereteket tartalmazó bevezetés után a könyv a rotációs szenzorok elvi alapjait tárgyalja, majd az építőelemekkel (integrált optikai elemek, üvegszálak, fényforrások) foglalkozik.

A negyedik fejezet az üvegszálak rotációs szenzor rendszereket írja le külön tárgyalva az ún. nyílt hurkú és a zárt hurkú megoldásokat.

Az ötödik fejezet a pontosságot korlátozó tényezőket tárgyalja, a hatodik pedig néhány új elképzelést ír le.

A hetedik fejezetben az optikai szálaknak más szenzorokban (mágneses, feszültség, akusztikus, gyorsulás mérő) való alkalmazását ismerteti.

Az utolsó nyolcadik fejezet piacelemzéssel foglalkozik.

A könyv nem csak a téma szakemberei, hanem a közeli területek érdeklődő szakemberei számára is hasznos információkat szolgáltat, élvezetes, jól áttekinthető, közérthető formában.

Króó Norbert

G. Ludwig: Foundations of Quantum Mechanics, I. Texts and Monographs in Physics Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1983

Szerző legelőször 1954-ben publikált összefoglaló tankönyvet a kvantummechanika alapjairól „Die Grundlagen der Quantenmechanik” címmel (Springer-Verlag). Az időközben eltelt három évtized során G. Ludwig számos könyvében és tanulmányában dolgozta ki, mélyítette el a kvantumelmélet értelmezésével, megalapozásával és leírásával kapcsolatos problémákra kínált megoldásait. E törekvések tankönyvszerű szintézise tehát — és nem egyszerű „átdolgozott fordítás” az 1954-es kiadásból — ez a könyv, amelyet két kötetre tervezett. Ludwig célkitűzése, hogy a kvantummechanika alapjainak matematikailag jól definiált megfogalmazását mutassa be és levonja e megfogalmazás következményeit a kvantummechanika alkalmazásaiban, a megalapozás konzisztenciájának és tanulságainak következetes feltárása érdekében. A megalapozás abból indul ki, hogy lehetséges a mérőberendezések, preparációs és regisztráló folyamatok makroszkopikus leírása. Ebben a tekintetben Niels Bohr nyomdokain halad. Nem állítható — bár ez tulajdonképpen egy specializálódás céljait szolgáló tankönyvtől sem okvetlenül követelhető meg — hogy a szükséges matemati-

kai fegyvertárat a könyv teljesen felölelné, e tekintetben a végső megállapítást csak a második kötet megjelenése után lehet majd tenni.

A könyv, akár mint a kvantummechanika axiomatikus megfogalmazása terén nyert jelentős eredmény tankönyvi formája, akár mint hasonló vizsgálatok katalizátora a relativisztikus kvantummechanikában, ill. az erők kvantumelméletében maradó érték képvisel és jó szolgálatot fog tenni olvasóinak.

Abonyi Iván

Jagdish Mehra—Helmuth Rechenberg: The Historical Development of Quantum Theory

Vol. 2. The Discovery of Quantum Mechanics 1925

Vol. 3. The Formulation of Matrix Mechanics and Its Modifications 1925—1926

Vol. 4. Part 1. The Fundamental Equations of Quantum Mechanics 1925—1926.

Part 2. The Reception of the New Quantum Mechanics 1925—1926.

Springer-Verlag, Berlin—New York—Heidelberg, 1982.

Szerzők nagy arányú vállalkozásáról az elsőként megjelent, két kötetben kiadott első könyv kapcsán már szoltunk a Magyar Fizikai Folyóirat lapjain (260. old.). Ezért most már csak a sorozat legtöbb megjelent három könyvét mutatjuk be közelebbről.

A második könyv (vol. 2.) lényegében Werner Heisenberg kutatásainak, úgyszólván szellemi fejlődésének tükrében mutatja be a primitív kvantumelmélet krízisét, azokat a lépéseket, amelyek a spektroszkópiában a döntő pontig vezettek. Időrendben részletesen bemutatja Sommerfeld, Born, főleg Niels Bohr, majd Pauli és mások szerepét a végleges törvényszerűségek kimondásához vezető úton. A fiatal Heisenberg rendkívül részleges és jól dokumentált portréjában kiemelkedő helyet foglal el Niels Bohr korrespondencia-elvének megszületése.

A harmadik könyv (vol. 3.) a mátrixmechanika kialakulásának körülményeiről szól. Bemutatja, hogyan kerül sor a mátrixelmélet alkalmazására az atomfizikában, hogyan kellett a mátrixelmélet úgy továbbfejleszteni, hogy alkalmas legyen erre a szerepre, milyen módon felelt meg ennek a fizikai feladatnak (mik voltak az első sikerek), hogyan kellett továbblépni, hogyan született meg az operátorfogalom a kvantumfizikában, hogyan illeszkedett be a spin fogalma. A tulajdonképpen fizikájában ismerős tények e történeti vizaidézését az teszi hallatlanul érdekessé, hogy napról napra végigizgulhatjuk a felfedezők küzdelmét. Ezt az előadásmódot a felvonultatott dokumentumrészletek (idézett cikkek, levelek, naplók, szemtanúk és a szereplők visszaemlékezéseiből) teszik teljessé.

A negyedik könyv (vol. 4.) első része P. A. M. Dirac szerepének részletes bemutatásával foglalkozik, megint egy eddig szokatlan portré Dirac szellemi fejlődéséről és korai alkotásairól. A második rész az új (mátrix) elmélet fogadtatását elemzi „kicsiben” Göttinga és Koppenhága köreiben, majd „nagyban” az európai és az amerikai szakmai berkekben.

Miként az első könyveknél tettük, úgy most is kiemeljük, hogy szerzők nagy és igényes vállalkozásán túlmenően azt is fontosnak tartjuk, hogy a többé-kevésbé hozzáférhetetlen archív anyagokat — kellő válogatással ugyan, de — hozzáférhetővé tesszik, ezáltal a dokumentálható realitás talajára állítják az eddig anekdóta-szintű elemeket (Heisenberg doktori szigorlata. Pascual Jordan szerepe a mátrixelmélet bevonásában stb.). Azáltal, hogy a kezelhetővé tett archívumban az olvasó kedvére tanulmányozhatja a dokumentumok tükrében a fizika előtt tornyosuló feladatokat és a fizikusok erőfeszítéseit a problémák megoldására, minden bizonnyal sokat nyer a modern kvantumelmélet, mind a pedagógiai, mind a filozófiai megítélés szintjén.

Fel szeretnénk hívni a figyelmet még arra, hogy ezekben a könyvekben is rátaláltunk hazánk fiaira: Eötvös Loránd, Fejér Lipót, Kerekjártó Béla, Szász Ottó és Szilárd Leó említése mellett Kármán Tódor, Lánczos Kornél és Neumann János szerepének részletes méltatásával találkozhattunk.

Abonyi Iván

A. J. Lichtenberg—M. A. Lieberman: Regular and Stochastic Motion.

Applied Mathematical Sciences 38.

Springer N. Y.—Neidelberg—Berlin. 1983. 499 oldal, 140 ábra

Izgalmas, de merész vállalkozás ma a determinisztikus dinamikai rendszerekben fellépő reguláris, ill. véletlen viselkedésről monográfiát írni. Ez a — nemcsak, de főleg — a matematikusok és a fizikusok érdeklődésének gócpontjában álló terület oly távoleső problémakörök, mint a bolygómozgás stabilitása, valamint a turbulencia kérdései mellett a természet- és a műszaki tudományok szá-

mos ágával: pl. plazmafizika, statisztikus mechanika, kémiai reakciók elmélete, morfogenezis is kapcsolatos, sőt már a közgazdaságtantól sem idegen. Nemcsak a vizsgált modellek változatossága teszi nehezzé, hanem az is, hogy egyetlen konkrét modell megértéséhez is eltérő és mély matematikai diszciplínák, pl. a topológikus dinamika, az invariáns tóruszok Kolmogorov—Arnold—Moser-elmélete, bifurkációelmélet, nemlineáris funkcionálanalízis, ergodelmélet stb. ismerete szükséges. A hét fejezetből hat a Hamilton-rendszerekben megjelenő sztochasztikus viselkedésről szól. Az első, bevezető és áttekintő jellegű fejezet után tárgyalja a kanonikus perturbációelméletet (2. fejezet), a lineáris stabilitáselméletet (3. fejezet), leírja a teljes káoszhoz való átmenetet (4. fejezet), elemzi a sztochaszticitás fogalmát és különféle formáit, továbbá a diffúzió jelenségét (5. fejezet), majd 2-nél magasabb szabadsági fokszámú rendszerekben vizsgálja a rezonanciajelenségeket és az Arnold-diffúziót (6. fejezet). A 7. fejezet foglalkozik disszipatív dinamikákkal — főleg 1- és 2-dimenzióban.

A szerzők matematikai szigor helyett elsősorban fizikai szemléletet kívánnak adni. Céljuk a gyakorlatban jól használható módszereket bemutatni a determinisztikus viselkedés sztochasztikusba való átmenetének elemzésére, és ez utóbbit jellemzésére, erősen támaszkodva numerikus eljárásokra. A témában járatos olvasó így valóban jól használható kézikönyvet kap, amely referenciaként szolgálhat a különféle jelenségekben fellépő gazdag viselkedésminták áttekintéséhez és tanulmányozásához. Nincs szó általában a jelenségek mélyén rejlő matematikai, képek és problémák leírásáról, igaz, ezt a szerzők nem is ígérik. Hiányolható azonban az egységesebb szerkesztés és szemlélet, bár épp e téma széles spektruma miatt ez igen nehéz és világoszerte is csak kevesen rendelkeznek a megfelelő szemlélettel. Használható e mű bevezetesként is, feltételezve alapvető mechanikai ismereteket. Szerencsére magyar nyelven már létezik egy tanulmánygyűjtemény (A KÁOSZ: Véletlenszerű Viselkedés Nemlineáris Rendszerekben, szerk.: Szépfalusi Péter, Tél Tamás, Akadémiai Kiadó, 1982), amely témájában erősen rokon az ismertett monográfiával, és párhuzamos használatát igencsak ajánlhatjuk.

Szász Domokos

R. M. White: Quantum Theory of Magnetism
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1983.

A Springer kiadó Solid-State Science sorozatának 32. köteteként látott napvilágot a Mágnesség kvantumelmélete c. kötet, amely a McGraw Hillnél 1970-ben megjelent első kiadás javított és korszerűsített változata.

Bár a mágnesség az egyik legrégebben tanulmányozott fizikai jelenség, de továbbra is aktívan változó, fejlődő tudományterület, ugyanis a mágneses jelenségek leírása a kvantummechanika, a statisztikus fizika és az elektromágnesség elméletének komplex alkalmazását igényli. Egyre újabb mágneses anyagokat állítanak elő, a kísérleti lehetőségek határai egyre messzebb tolódnak, így a mágnesség témaköre is egyre szélesebb lesz. A Mágnesség kvantumelmélete figyelembe veszi a témakör tágulását és egységes elírástban tárgyalja a klasszikus fejezetekkel. A szerző a mágneses szuszceptibilitás fogalmát — mint a töltések és áramok lehetséges rendszerének, a kristálynak külső behatásra, azaz a mágneses térre adott jellegezetes válaszfüggvényét — használja a mágneses jelenségek széles körének leírására és megértésére.

A könyv első két fejezete a továbbiak megértéséhez feltétlenül szükséges alapfogalmakat tárgyalja, a mágneses momentumot, a mágnesezettséget, az általánosított szoszceptibilitást. Mivel az idő- és térfüggő mágneses terek rendszerint nem túl erősek, és így a gerjesztések is gyengék, ezért válasz jó közelítéssel lineáris lesz. A könyv nem tárgyalja a nemlineáris hatásokat, pl. a hiszterézis-jelenségeket. Tehát a leírás megmarad a hullámvektor és frekvenciafüggő lineáris szuszceptibilitás, a lineáris válaszelmélet keretein belül.

A második fejezetben a szerző felépíti a mágneses Hamilton-függvényt, figyelembe véve és katalogizálva mindazon kölcsönhatásokat, amelyek egy szilárdtestben felléphetnek. Természetesen, egy teljesen általános hamiltonián kezelése egyelőre nem időszzerű, így a gyakorlatban használható fenomenológikus Hamilton-függvények leírására is sor kerül.

A külső mágneses tér általános hely- és időfüggő, tehát az eredő mágnesezettség szintén hely- és időfüggő lesz. A könyv 3. és 5. fejezte tárgyalja a statikus jelenségeket. A harmadik fejezetben találjuk a nem kölcsönható rendszerek statikus szuszceptibilitását (diam- és paramágnesség), külön alfejezetben a lokalizált momentumok és külön az itinerens elektronok esetére (szigetelők és fémek); kitérve a szuszceptibilitás mérésének legfontosabb módszereire is.

A 5. fejezet kölcsönható rendszerek, azaz hosszú távú mágneses rendeződést mutató anyagok (ferro-, ferri-, antiferromágneses anyagok) statikus szuszceptibilitásával foglalkozik az effektív tér leírás keretében, ugyancsak különválasztva a lokalizált momentumok esetét a fémektől. A kritikus pont körüli jelenségek leírása is itt található.

Az 5. és a 6. fejezet tárgyalja a gyengén, ill. az erősen kölcsönható rendszerek dinamikus szuszceptibilitását, azaz a mágneses rendszerek válaszát időfüggő gerjesztések esetén: a paramágneses rezonancia és relaxációs effektusokat az 5. fejezetben, a mágneses gerjesztések rendszerét mágnesesen rendezett anyagok esetén a 6. fejezetben.

A 7. fejezet a mágneses szennyezőknek azt az esetét tárgyalja, amikor mágneses szennyezőt mágneses mátrixba helyezünk, mivel a nem mágneses mátrixban oldott mágneses szennyezőket a paramágnességgel foglalkozó fejezetek tárgyalják. A leírás a szigetelő mátrix egyszerűbb esetével kezdődik és a fémekkel folytatódik, tárgyalva a lokalizált momentumok kialakulását, a Kondo-effektust, majd a szennyező-koncentráció növelésekor fellépő jelenségeket, mint az RKKY kölcsönhatás, a spinűveg probléma és a mikromágnesség.

A 8. fejezet a neutronszórás, mint a szilárdtestek tanulmányozásának egyik legfontosabb módszerét mutatja be.

Természetesen, ennek a hatalmas kiterjedésű anyagnak csak az alapjait lehet egy kevesebb, mint 300 oldal terjedelmű könyvben bemutatni. Az olvasónak Van Vleck: *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities* c., 1932-ben kiadott, máig is korszerű műve jut eszébe. White könyvének első átlapozásakor, majd tapasztalja, hogy ugyanaz a fogalom — a szuszceptibilitás — mennyire alkalmas a jelenségek sokkal szélesebb körének adekvát leírására, további 500 év fejlődésének figyelembevételére. A Quantum Theory of Magnetism a mágneses jelenségek egységes bemutatásán kívül a mágnesség és a fizika egyéb területeinek kapcsolatát is megvilágítja, teszi mindezt röviden, világosan és egyszerűen, még abban az esetben is, ha egyes fogalmakat kénytelen ad hoc bevezetni. A könyv különösen ajánlható egyetemi hallgatóknak (és előadókknak), kísérleti fizikusoknak, de haszonnal forgathatják a határterületek művelői a biológia és a kémia területén is.

(K. E.)

**Imre László: Hőátvitel összetett szerkezetekben
Akadémiai Kiadó, Budapest 1983. 679 oldal**

A könyv a termikus rendszerszimuláció korszerű módszereit foglalja össze, ismertetve azokat a fizikai, hőtechnikai és matematikai ismereteket, amelyek a modellalkotáshoz nélkülözhetetlenek. A szerző gondol azokra a mérnökökre is, akik esetleg tanulmányaik során egyes matematikai ismereteket még nem sajátíthattak el, és ezt pótolja a jól összeállított matematikai részletekkel. Célja, az, előszóban kifejtett indokolás szerint az, hogy segítséget nyújtson a fejlesztő és tervező mérnököknek a pontosabb információkra alapozott, túlméretezést elkerülő gazdaságos és energiatakarékos konstrukciók kifejlesztésében. A könyv tartalma, felépítése és tárgyalásmódja tekintetében egyaránt újszerű és jól szolgálja az oktatás céljait is. Az alkalmazásokat számpéldákkal illusztrálja és bőséges bibliográfiát ad a részletkérdésekben jobban elmélyülni kívánó olvasók számára.

A könyv öt főrészből és ezeken belül 11 fejezetből áll.

Az I. Rész a hőátviteli folyamatok elméleti alapjait tárgyalja a hőfogalom értelmezésével, az energiahordozó hatások vizsgálatával és a transzportfolyamatok legáltalánosabb megfogalmazásával. Részletbemenően ismerteti a hőátviteli folyamatok alapformáit és az átvitel mechanizmusát.

A II. Rész a transzportelméleti megalapozás után ismerteti a hálózatos modellezés alapelvét, majd a hőáram-hálózati modellek felépítésének módszereit és a modellezés hibaokait elemezve mutat rá a modellalkotás főbb fogásaira.

A hőáramhálózatok leíró egyenletrendszerét ismertetve bemutatja és értékeli az állandósult állapotokra vonatkozó megoldás különböző módszereit. Ezeken belül, de az irodalomban egyedülálló módon, ismerteti a lineáris hőáramhálózatok leírására és számítására alkalmas, Gráf-mátrixok felhasználásán alapuló általános módszereket. Nagyon értékes és újszerű része a könyvnek az áramló közegekkel hűtött rendszerek szimultán hőáram- és tömegáram-hálózatos modellezésének bemutatása lineáris és nemlineáris esetben.

A hőáramhálózatok számítását tranziens állapotra igen komoly alapossággal és matematikai apparátussal tárgyalja. Bemutatja az alpmátrix analitikus megoldásainak módszereit, lehetőségeit és korlátait, majd kitér az időben diskretizált numerikus módszerek ismertetésére. Részletesen elemzi a nemlineáris hőáramhálózatok tranziens megoldását különböző termikus csatlások esetén.

Újszerű terület a könyvben a termomechanikai rendszerek tranziens vizsgálata, a szimultán termomechanikai modellek felépítése és egyenletrendszerének megoldása.

A III. Rész a diskretizált módszerek egyik igen fontos változatát, a véges-differencia módszert ismerteti. Az ismertetés valamennyi korszerű és hatékony módszer jól felépített és rendszerezett elemzését mutatja be állandósult és tranziens hőmérsékleteloszlások meghatározására. Figyelemre méltó a nemlineáris tranziens hővezetési problémák megoldása három időszintű sémák alkalmazásával.

A IV. Rész a hőmérsékleteloszlások meghatározását tárgyalja a véges elemek módszerével. E módszert, termikus feladatok megoldására, a könyv elsőként mutatja be magyar nyelven. Szerencsésen és az irodalomban egyedülálló módon, a végeselem módszert, mint a hőáramhálózati egyenletrendszer tranzienis megoldásának egyik lehetőségét vezeti be. Ugyancsak a könyv érdeméeként említhető, hogy a variációs elveken alapuló végeselem módszerek tárgyalása során a variációs elvek fizikai alapjait nyúlók vissza. Részletesen ismerteti és elemzi az egyes elemcsaládokat és az izoparametrikus elemeket. Az alkalmazások során két és három dimenziós hővezetési problémák végeselemes megfogalmazását ismerteti állandósult és tranzienis esetekben, majd a nemlineáris hővezetési problémák végeselemes megfogalmazását tárgyalja. Végül ismertetőt nyújt a végeselemes megoldások számítógépes eljárásairól, majd a végeselemes és a végesdifferencia módszernek, a szakemberek körében sokat vitatott összehasonlításával foglalkozik.

A könyv V. Része függelék, amely a felhasznált fogalmak értelmezésével, összefoglalásával és az alkalmazott matematikai apparátus főbb fogalmaival és összefüggéseivel fejezi be a kötetet.

A könyv igen jelentős elméleti és alkalmazási ismeretanyagot tartalmaz és értékes nyeresége a magyar műszaki szakirodalomnak.

Csoma Zsigmond

**R. Brunetaud, D. Coutsouradis, T. B. Gibbons, Y. Lindblom,
D. B. Meadowcroft, R. Stickler (ed.-s):**

High Temperature Alloys for Gas Turbines 1982

Proceedings of a Conference held in Liège, Belgium, 4–6 October, 1982

A repülőgépekben és földi berendezésekben alkalmazott gázturbinákkal szemben támasztott megbízhatósági követelmények egyre növekszenek. 1971-ben az Európai Közös Piac országai széles körű együttműködési programot dolgoztak ki a gázturbina anyagok előállításával és minőségük javításával kapcsolatos kérdések tanulmányozására. A könyv az utóbbi évek során elért eredmények áttekintésére szervezett második nemzetközi konferencia anyagát tartalmazza (az első ilyen konferenciát 1978-ban szervezték, ugyancsak Liège-ben).

A konferencia anyaga az alábbi három, fő kérdéskört öleli fel:

- I. Korrozio és korroziovédelem
- II. Fárasztás, kúszás és szerkezeti stabilitás
- III. Előállítási folyamatok

A könyv 54 dolgozatot tartalmaz. A bevezető dolgozat a Ni és Co alapú szuperötvözetekről és felhasználásukról ad áttekintést. Ismerteti új anyagok (pl. kompozitok) és új technológiák (pl. nagy sebességű megszilárdítás) alkalmazásának lehetőségeit.

Kilenc dolgozat foglalkozik a korrozióval és korroziovédelemmel. Ebből hat összefoglaló dolgozat. Ezek részletes áttekintést adnak a magas hőmérsékleti korrozio mechanizmusairól különböző környezeti hatások figyelembevétele mellett (pl. hajóturbinák esetén). Részletesen elemzik a legújabb eredményeket a különböző korrozioálló védőbevonatok készítésével kapcsolatban mind a felhasznált anyagok, mind a felvivő eljárások (pl. plazmaszórás) szempontjából. Alapvető ismereteket foglalnak össze a laboratóriumi gyorsított korrozio vizsgálatok eredményeinek gyakorlati felhasználásáról.

Harmincegy dolgozat foglalkozik a gázturbinákban felhasznált anyagok kúszásával, fáradási és mechanikai stabilitási tulajdonságaival. Ezek közül tíz összefoglaló dolgozat, amelyek részletesen tárgyalják azokat a mechanizmusokat, amelyek alapvetően megszabják a magas hőmérsékleten terhelte szerkezeti anyagok élettartamát. Beható vizsgálatok eredményeiről kapunk áttekintést a kúszási szilárdság növelésével, a fáradásos töréssel foglalkozó munkákból. Külön-külön dolgozat tárgyalja a kobalt adalék, valamint a korrozio elleni védőréteg hatását a nikkel alapú szuperötvözetek mechanikai tulajdonságaira, és általában a magas hőmérsékleti korrozio hatását az ötvözetek mechanikai viselkedésére. Az összefoglaló munkákat követő 21 eredeti dolgozat sok új eredményt ismertet a gázturbinákban felhasznált ötvözetek fárasztási és kúszási tulajdonságairól és az ötvözetek magas hőmérsékleti szilárdságát döntően befolyásoló fázisstabilitásról, valamint a mikroszerkezetet befolyásoló védőréteg és környezeti hatásokról.

A harmadik rész 13 dolgozatában a szuperötvözetek előállítási technológiájának kérdései szerepelnek (olvadék előállítás, öntés, porkohászat, hegesztés stb.). A bevezető dolgozat áttekintést ad olyan új technológiai eljárásokról, mint az egykristály alkatrész előállítás és nagy sebességű megszilárdítás.

A csaknem 1100 oldal terjedelmű mű felöleli a magas hőmérsékleti ötvözetek minden lényeges kérdéskörét, alapvető ismereteket nyújt a magas hőmérsékleten nagy szilárdságú ötvözetek lényeges

tulajdonságairól. Ezért a könyv nemcsak a gázturbinákkal foglalkozók számára hasznos, hanem legújabb ismereteket és széles körű adatokat tartalmazó kézikönyvként szolgál mindazoknak, akik a nagy szilárdságú, termikusan stabil ötvözetek iránt érdeklődnek.

Kovács István

**Tóth Árpád: A lakosság természetes sugárterhelése
Akadémia Kiadó, Budapest, 1983.**

Mekkora veszélyt vállal az emberiség a nukleáris technológia alkalmazásával, elsősorban is a villamos energia előállítására szolgáló atomerőművek építésével és üzemeltetésével? Napjainkban gyakran hangzik el, és nem csak (sőt inkább nem) szakemberek szájából a fentihez hasonló kérdés. A válaszok a kérdést elbagatelizáló kézlegyintéstől az apokaliptikus jövődölesekig széles skálán helyezhetők el. A válaszok spektrumának szélessége, mint az oly sok más esetben is kimutatható, az alapvető ismeretek hiányával van összefüggésben. Mindaddig, amíg valami mérhetetlen, addig lehet nagy is, kicsi is, megítélése szélsőségesen szubjektív. Hogyan, mihez mérjük a nukleáris technológia veszélyeit? Mi az a mérték, amit mindenki elfogad, amikor az atomerőművek okozta radioaktív környezetszennyezésről beszélünk? Valóban újszülött szörnyetege-e a radioaktív sugárzás modern korunknak, mint azt sok laikus hiszi?

Az Akadémiai Kiadó „A sugárvédelem újabb eredményei” c. sorozatában első kötetként megjelenő könyv régi hiányt pótol. A hazai szakirodalomból mind ez ideig hiányzott a lakosság természetes forrásokból eredő sugárterhelésének összefoglaló feldolgozása. A szerző a teljesség igényével veszi sorra mindazokat a potenciális sugárforrásokat, amelyek az ember természetes környezetében találhatók és nem a nukleáris technológia termékei. Számok, eloszlások, modellek segítségével alkot hat realis képet az olvasó a természetes eredetű ionizáló sugárzás forrásairól, fajtáiról és mértékéről.

Az emberi szervezetet kívülről érő természetes eredetű sugárzás elsősorban a világűrbeli érkező töltött részecskékből és fotonokból, valamint a talajban, épületfalakban és szerkezeti anyagokban levő radioaktív izotópok (^{238}U , ^{226}Ra , ^{232}Th és ^{40}K) gamma-sugárzásából áll.

A szervezet belső sugárterhelését részben a test alapvető alkotó elemének, a szénnek és a káliumnak a radioaktív izotópjai (^{14}C , ^{40}K), részben pedig a beléggzéssel vagy lenyeléssel szervezetbe jutó természetes radioizotópok (elsősorban a radon) adják. A források erőssége tág határok között mozog; a kozmikus sugárzás a napciklus ingadozását követi, a földi eredetű gamma-sugárzás helyről helyre változik (az átlagosnál három nagyságrenddel nagyobb háttérsugárzást is mértek már!), a tüdő radonterhelését számos tényező (építőanyag, építési technológia, falszigetelés és szellőztetés stb.) befolyásolja. És mindehhez vegyük hozzá, amit korunk technikája hozzáad: a légi- és űrutazások során megnövekedett kozmikus sugárzást, a széntüzelésű erőművek pernyéjében és salakjában feldúsult ^{238}U - és ^{226}Ra aktivitást, az átlagosnál nagyobb természetes radioaktivitású építőanyagok alkalmazását, a fogyasztási cikkekbe kevert radioizotópokat és mindazokat az eljárásokat, amelyeknek következtében nő a természetes sugárterhelés.

A szerző az elérhető külföldi és hazai szakirodalom feldolgozásával a legújabb mérések figyelembevételével, sok esetben saját kutatási eredményeinek közlésével ismerteti meg az olvasót a lakosság természetes sugárterhelését okozó forrásokkal, az elszennvedett dózisos nagyságával és eloszlásával. Ebből az ismeretből meríthetjük azt a mértéket, amellyel a bevezetőben említett nem természetes eredetű, a nukleáris technológia által létrehozott sugárforrások okozta (az eddigi tapasztalatok szerint a természetesnél 2–3 nagyságrenddel kisebb) terhelés összemérhető, és amelyek bemutatása remélhetőleg egy nem túl távoli jövőben megírandó könyv témája lehet.

Zombori Péter

**Földiák Gábor és Stenger Vilmos: Kísérleti és ipari gamma-besugárázóberendezések és alkalmazásuk
Akadémia Kiadó, Budapest, 1983.**

A sugártechnikák növekvő ipari alkalmazásának lehattünk tanúi az elmúlt évtizedekben. A nukleáris energiatermelés beindítása mellett fokozatosan nő a radioaktív anyagok sugárázó energiáját közvetlenül hasznosító ipari berendezések száma is. Ezeket a besugárázó berendezéseket ma már a gazdaság számos ága tudja hasznosítani; a mezőgazdaság és élelmiszeripar csakúgy mint a gyógyászati eszközgyártás vagy a vegyipar eszköztárába vette őket. A létesítmények méretei, műszaki megoldásai különbözőek, a kísérleti-laboratóriumi eszközöktől a fűlüzemi berendezéseken át egészen a nagyüzemi besugárázó létesítményekig találkozhatunk velük. Ami közös, az a működés elve: az ionizáló sugárzás energiájának hasznosítása.

Földiák Gábor és Stenger Vilmos könyve a besugárzó eszközök egyik leggyakrabban alkalmazott fajtáját, a radioaktív anyagok gamma sugárzását felhasználó berendezéseket ismerteti meg az olvasóval. A kézikönyv jellegű, tömör, de a téma minden vonatkozását érintő munkát ajánljuk mindazok figyelmébe, akik ilyen berendezések létesítését tervezik vagy már meglevő eszközt üzemeltetnek, de hasznos lehet azon szakemberek számára is, akik kutatási, termelési feladatuk megoldásában hozzáférhető közelségben levő gamma besugárzó berendezés alkalmazásától remélhetnek segítséget. A könyv ismerteti a leggyakrabban használt sugárforrások fontosabb adatait, gyártásának módját és az egyes tipikus alkalmazásokra jellemző elrendezések és besugárzó berendezések paramétereit, mindez fontos információ lehet ilyen típusú létesítmények előzetes megválasztásánál.

A besugárzással kezelt termékekben bekövetkező változások fajtája és mértéke az elnyelt sugárdózis függvénye. Ha a dózis túl kicsi, nem érjük el a kívánt hatást, túl nagy dózis esetén a termék károsodhat. A megfelelő nagyságú dózis közlésére is számos lehetőség nyílik, amelyek közül technológiai-gazdaságossági szempontok alapján kell a legjobbat kiválasztani. Ehhez kap segítséget az olvasó a besugárzó berendezések dózistérének számításával, modellezéssel és dozimetriai mérésekkel történő meghatározásáról szóló fejezetekben. A dózis és dózistelési mérték méréseire szolgáló eszközök kiválasztásához számos ötlettel és tanáccsal szolgálnak a szerzők.

A radioaktív anyagokat tartalmazó besugárzó berendezés veszélyes üzem. Létesítése gondos tervezést és kivitelezést, üzemben tartása állandó technológiai fegyelmet követel meg és gyakori ellenőrzést tesz szükségessé. A műszaki (sugárforrások és dózistér mérése) és egészségügyi (sugár- és munkavédelmi, biztonságtechnikai) jellegű időszakos ellenőrzésekről, ill. a (külső és belső) sugárzás elleni védekezés módjairól ugyancsak jól összefogott képet kapunk a könyvből.

Az Akadémiai Kiadó új könyve, bár szerzői szándéka szerint igyekszik a téma minden vonatkozását az olvasó elé tárni, korlátozott terjedelme miatt sok mindenre csak röviden utalhat. A téma iránt mélyebben érdeklődőket azonban gondosan feldolgozott és gazdag szakirodalmi hivatkozások igazítják útba.

Zombori Péter

H. Fritsch: Quarks Pipel-Verlag. München, 1982.

A Pipel nyugatnémet könyvkiadó gondozásában jelent meg H. Fritsch, a müncheni egyetem elméleti fizikai tanszéke professzorának *Quarks* című könyve 1980-ban. 1982 áprilisában látott napvilágot a negyedik, átdolgozott német nyelvű kiadás; közben kiadták a könyvet angol, francia s egyéb nyelveken is.

A könyv témáját a modern fizika egyik legfontosabb és legizgalmasabb frontja: a részecskefizika, a szubatomi világ képezi. Ez az a terület, ahol manapság a legalapvetőbb, a világról alkotott felfogásunkat gyökeresen megváltoztató új ismeretek születnek, ahol a természet „végső” titkait ostromoljuk: milyen „elemi” részecskékből tevődik is össze a bennünket körülvevő bonyolult, színes világ. A terület fundamentális jelentősége és érdekessége vitán felül áll. Ugyanakkor a megértéséhez vezető út a kívülállók számára nem könnyen járható. Ennek egyik oka, hogy a fejlődés során nagyon sok új fogalom született, kialakult egy speciális szakmai zsargon és ezenkívül mind az elmélet, mint a kísérlet területén speciális apparátus született: az elméletben absztrakt matematikai formalizmus, a kísérletben pedig egészen speciális új technika, például a gyorsítók és a detektáló berendezések területén, amelyek költségesek és ezért a világon csak néhány helyen találhatók.

Eppen ezért igen nagy jelentőségű egy olyan mű megjelenése, amely azt tűzte ki célul, hogy az e területen nem járatos, de ez iránt érdeklődő olvasót közelebb vigye a kutatási terület atmoszférájához, érzékeltesse vele az itt folyó kutatásokat és ismertesse a legfontosabb fogalmakat, trendeket. Ez nem könnyű feladat. Meglehetősen hosszú bevezetésre van szükség és a fogalmak törvényszerű, logikus, didaktikailag átgondolt egymásra építésére.

A részecskefizikában 1970 óta „forradalom” ment végbe. Ennek a forradalomnak a kezdetét új „elemi” részecskéknak, az ún. kvarkoknak a megjelenése jelezte. Azóta rohamos fejlődésnek lehetünk a szemtanúi mind elméleti, mind kísérleti vonalon.

A könyv első felében a szerző röviden ismerteti az atomfizika alapfogalmait, majd áttér az atomfizikáról a magfizikára és a részecskefizikára a klasszikus területeire. Ezek azok a részek, amelyek ajánlhatók a természettudományok, pontosabban a modern fizika kérdései iránt érdeklődő, de abban nem járatos értelmiségi olvasónak.

A könyv második fele más jellegű: az első részben megismert alapfogalmakra építve, mélyebben behatol a legújabb részecskefizikai fogalmak és elméletek erdejébe, és megismerteti bennünket az erős kölcsönhatásokkal (matematikai apparátus nélkül, kvalitatíve). Ez a rész — megítélésem szerint — lehet hogy némileg próbára teszi az átlag érdeklődő, nem fizikus olvasót. Ugyanakkor nagy

haszonnal forgathatják fizikusok, akik nem a részecskefizika területén dolgoznak, de meg szeretnék ismerkedni a fizikának ezzel a fejezetével. Ugyancsak érdekes kirándulás lehet ipari fizikus szakemberek számára, továbbá érdeklődő alsóéves fizika szakos egyetemi hallgatóknak (a felsőévesek ezekkel az ismeretekkel sokkal szigorúbb, pontosabb matematikai megfogalmazásban megismerkedhetnek). Talán meg lehetne kockáztatni azt a megjegyzést is, hogy nem haszontalan e könyv elolvasása és megismerése azon kísérleti részecskefizikusok számára sem, akik a kísérleti munka napi teendői mellett nem mindig tudnak időt szakítani arra, hogy nyomon kövessék az elmélet rohamos fejlődését, a maga mélységében, matematikai apparátusával. Ezek számára ez a könyv röviden összefoglalva nyújtja a szükséges *kvalitatív* ismereteket.

A könyv olvasásának és megértésének a nehézsége nem egyenletes, ám az előbb elmondott struktúrából is következik; az első része olvasmányos és könnyen emészthető, a másik része nagyobb figyelmet, vissza-vissza lapozást igényel. Nagyon ügyes didaktikai fogás, hogy az egyes oldalak margóján néhány rövid összefoglaló szó nemcsak azt jelzi, hogy a mellette levő szövegben miről van szó, hanem önmagában véve is összevont ismereteket nyújt, a részletek nélkül. A könyv elősorban a fizikai gondolkodás fejlődését, új fogalmak megjelenését, az egész fejlődés belső logikáját mutatja meg, de nem szigorúan véve elméleti, hiszen mindezt kvalitatíve, matematikai apparátus, pontos számítások nélkül teszi — s ez, mint ismeretterjesztő könyvnek, feltétlenül dicséretes tulajdonsága.

A könyv mintegy 320 oldal, 91 képpel, több fényképfelvétellel. A művet egy nagyon rövid irodalomjegyzék egészíti ki, továbbá rövid lexikonszerű rész, amely megítélésem szerint lehetne bővebb is. Ugyanez vonatkozik a név- és tárgymutatóra, amely a szokásosnál sokkal rövidebb.

A könyv megértése — feltételezve a könyv elejétől kezdődő alapos és elmélyült olvasást — elvben középiskolai ismereteket, érettségi tételtel fel. Gyakorlatban időnként ennél magasabb szinten használt fogalmak is említésre kerülnek, ezek megértése azonban némi segédeszközzel lehetséges. A könyv fogalmazása, a fogalmak bevezetése, stílusa könnyen érthető, olvasmányos és hűen követi az elmélet kifejlődésének logikáját. Helyenként izgalmas olvasmánnyá teszi az egymást követő, egymással kölcsönhatásban álló események kibontakozása és az elméleti, ill. az egész részecskefizika fejlődésére való hatása. A könyvhöz először írt a CERN (Nyugat-európai Részecskefizikai Kutató Intézet, Genf) jelenlegi főigazgatója, H. Schopper. Maga a szerző, mielőtt a müncheni egyetem professzora lett volna, hosszabb időt töltött a CERN-ben, továbbá a caltechi egyetemen (USA); jó áttekintéssel rendelkezik a fizika jelenlegi, mozgalmas életéről.

Nagyon nehéz feladatra vállalkozik az, aki közérthető nyelven, a szélesebb olvasóközönség számára akarja ismertetni tenni a modern részecskefizika fogalmait, eredményeit, kutatási módszereit. A nehézséget fokozza, hogy a rohamos fejlődés következtében a fogalmak és az elméletek a szokásosnál sokkal gyorsabban avulnak el, ezért az író nem mindig lehet biztos abban, hogy amit a könyv megjelenésekor leírt, néhány évvel később nem veszti el aktualitását. Szerencsére ilyesmi ezzel a könyvvel kapcsolatban eddig nem következett be. Úgy érzem, H. Fritzsche igen nagy szolgálatot tett a részecskefizika ismertetésével és a szélesebb társadalmi közeg számára való megértésével.

Kiss Dezső

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1982. december 23. — Terjedelem: 9,45 (A/5 ív)
83-5540 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOM

<i>Szőkefalvi-Nagy Zoltán</i> : Magnyomatékok mérése, belső mágneses terek vizsgálata Coulomb-gerjesztéssel	457
<i>Parragh Levente</i> : A kétfajta leptontöltéshez vezető tér vizsgálata	503
<i>Lendvay Ödön</i> : Vegyületfélvezetők	509

KÖNYVISMERTETÉS

<i>P. W. Hawke</i> (ed.): Magnetic Electron Lenses	535
Resonances in Heavy Ion Reactions	535
<i>Ja. B. Zseldovics</i> : A vákuum elmélete lehet, hogy megoldja a kozmikus talányt	536
<i>R. C. Whitten</i> (ed.): The Statospheric Aerosol Layer	537
<i>James Glimm, Arthur Jaffe</i> : Quantum Physics	537
<i>Peter Brüesch</i> : Phonons: Theory and Experiments I.	538
Dynamic of Nuclear Fission and Related Collective Phenomena	539
<i>Pradip Niyogi</i> : Integral Equation Method in Transonic Flow	539
<i>F. H. Schroeder</i> (ed.): Stability in the Mechanics of Continua	540
<i>David L. Book</i> (ed.): Finite-Difference Techniques for Vektorized Fluid Dynamic	541
<i>Demetri P. Telonis</i> : Unsteady Viscous Flows	541
<i>Robert G. Hunsperger</i> : Integrated Optics: Theory and Technology	542
<i>A. Ambrózy</i> : Electronic Noise	542
<i>B. K. Vainshtein, V. M. Fridkin, V. L. Indenbom</i> : Modern Crystallography II. Structure of Crystals	543
<i>I. A. Kunin</i> : Elastic Media with Microstructure I. One-Dimensional Models	544
<i>T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen</i> (ed.-s): Real-Space Renormalization	544
<i>G. Benedek, U. Valbusa</i> (ed.-s): Dynamic of Gas-Surface Interaction	545
<i>W. H. Marlow</i> (ed.): Aerosol Microphysics II. Chemical Physics of Microparticles	546
<i>Charles A. Weatherford and Herbert W. Jones</i> (ed.): ETO Multicenter Molecular Integrals.	547
<i>G. Höhler</i> (ed.) Landolt—Börnstein New Series I/9/b/2: Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles. Methods and Results of Phenomenological Analyses	548
Landolt—Börnstein II/14a: Molekuláris állandók	549
Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relations in Science and Technology, New Series, Group III. Volume 12, Subvolume b: Phonon States of Alloys—Electron States and Fermi Surfaces of Strained Elements	549
Landolt—Börnstein: Group III, 17b: Physics of II—VI I—VII compounds, Semimagnetic Semiconductors	550
<i>K. H. Bennemann—F. Brouers—D. Quitmann</i> : Ionic Liquids, Molten Salts and Polyelectrolytes	550
<i>U. Nigul and J. Engelbrecht</i> : Nonlinear Deformation Waves	551
<i>L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw</i> : Turbulent Shear Flows 3	552
<i>J. Pedlovsky</i> : Geophysical Fluid Dynamics	552
<i>H. H. Fernholz and E. Krause</i> : Three-Dimensional Turbulent Boundary Layers	553
<i>E. Krause</i> : Proceedings of the Eighth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics	553
<i>Roger Peyret and Thomas D. Taylor</i> : Computational Methods for Fluid Flow	554
<i>Gerhard Fieck</i> : Symmetry of Polycentric Systems	554
<i>S. Ezekiel and H. J. Arditty</i> : Fiber-Optic Rotation Sensors and related Technologies	555
<i>G. Ludwig</i> : Foundations of Quantum Mechanics. I.	555
<i>Jagdish Mehra—Helmuth Rechenberg</i> : The Historical Development of Quantum Theory.	556
<i>A. J. Lichtenberg—M. A. Lieberman</i> : Regular and Stochastic Motion	556
<i>R. M. White</i> : Quantum Theory of Magnetism	557
<i>Imre László</i> : Hőátvitel összetett szerkezetekben	558
<i>R. Brunetaud, D. Coutouradis, T. B. Gibbons, Y. Lindblom, D. B. Meadowcroft, R. Stickler</i> : High Temperature Alloys for Gas Turbines 1982	559
<i>Tóth Árpád</i> : A lakosság természetes sugárterhelése	560
<i>Földiák Gábor és Stenger Vilmos</i> : Kísérleti és ipari gamma-besugárzóberendezések és alkalmazásuk	560
<i>H. Fritzsch</i> : Quarks	561